

В.М.Галицкий, Б. М.Карнаков, В.И.Коган
ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Учеб.пособие для вузов. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Наука, 1992. 880 с.

Содержит задачи по квантовой механике. Ко всем задачам даны решения. 1-е изд. — 1981 г.

Второе издание книги существенно переработано и дополнено новым материалом.

Для студентов физических специальностей высших учебных заведений.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие		6
Принятые сокращения		8
Наиболее часто используемые обозначения		8
Универсальные константы		9
	Задачи	Решения
Глава 1. Операторы в квантовой механике	11	194
§ 1. Основные понятия теории линейных операторов	13	194
§ 2. Собственные функции, собственные значения, средние	15	197
§ 3. Проекционные операторы	18	206
§ 4. Элементы теории представлений. Унитарные преобразования	19	207
Глава 2. Одномерное движение	21	212
§ 1. Стационарные состояния дискретного спектра	23	212
§ 2. Уравнение Шрёдингера в импульсном представлении. Функция Грина уравнения Шрёдингера. Интегральная форма уравнения Шрёдингера	27	220
§ 3. Состояния непрерывного спектра. Прохождение через потенциальные барьеры	30	228
§ 4. Системы с несколькими степенями свободы. Частица в периодическом потенциале	33	241
Глава 3. Момент импульса	35	248
§ 1. Общие свойства момента	37	248
§ 2. Момент $L=1$	40	253
§ 3. Сложение моментов	41	257
§ 4. Тензорный формализм в теории момента	44	264
Глава 4. Движение в центральном поле	46	268
§ 1. Состояния дискретного спектра в центральных полях	47	268
§ 2. Состояния с малой энергией связи. Частица в совместном поле короткодействующего и дальнодействующего потенциалов	52	285
§ 3. Системы с аксиальной симметрией	55	293
Глава 5. Спин	56	299
§ 1. Спин $s=1/2$	58	299
§ 2. Спин-орбитальные состояния частицы со спином $s=1/2$. Высшие спины	62	309

§ 3. Спиновая (поляризацияционная) матрица плотности. Угловые распределения и корреляции в распадах	64	318
Глава 6. Изменение состояния во времени	66	324
§ 1. Представление Шрёдингера. Движение волновых пакетов	68	324
§ 2. Изменение во времени физических величин. Интегралы движения	70	332
§ 3. Унитарные преобразования, зависящие от времени. Гейзенберговское представление	72	337
§ 4. Временные функции Грина	74	349
§ 5. Квазистационарные и квазиэнергетические состояния	75	353
Глава 7. Движение в магнитном поле	77	363
§ 1. Стационарные состояния частицы в присутствии магнитного поля	78	363
§ 2. Изменение состояний во времени	81	376
§ 3. Магнитное поле орбитальных токов и спинового магнитного момента	82	380
Глава 8. Теория возмущений. Вариационный метод. Внезапные и адиабатические воздействия	83	383
§ 1. Стационарная теория возмущений (дискретный спектр)	85	383
§ 2. Вариационный метод	88	397
§ 3. Стационарная теория возмущений (непрерывный спектр)	89	405
§ 4. Нестационарная теория возмущений. Переходы в непрерывном спектре	91	414
§ 5. Внезапные воздействия	94	430
§ 6. Адиабатическое приближение	95	434
Глава 9. Квазиклассическое приближение	97	449
§ 1. Квантование энергетического спектра	100	449
§ 2. Квазиклассические волновые функции, вероятности и средние	104	475
§ 3. Прохождение через потенциальные барьеры	106	486
Глава 10. Тожественность частиц. Вторичное квантование	108	501
§ 1. Симметрия волновых функций	110	501
§ 2. Основы формализма вторичного квантования (представление чисел заполнения)	111	508
§ 3. Системы из большого числа $N \gg 1$ частиц	115	521
Глава 11. Атомы и молекулы	117	532
§ 1. Стационарные состояния атомов с одним и двумя электронами	118	532
§ 2. Многоэлектронные атомы. Статистическая модель атома	121	554
§ 3. Основные представления теории молекул	124	569
§ 4. Атомы и молекулы во внешних полях. Взаимодействие атомных систем	126	580
§ 5. Нестационарные явления в атомных си-системах	131	606
Глава 12. Атомное ядро	137	638

§ 1. Основные представления о ядерных силах. Дейтрон	140	638
§ 2. Модель оболочек	143	648
§ 3. Изотопическая инвариантность	146	660
Глава 13. Столкновения частиц	148	668
§ 1. Борновское приближение	155	668
§ 2. Фазовая теория рассеяния	159	686
§ 3. Низкоэнергетическое рассеяние. Резонансные явления при рассеянии	160	696
§ 4. Рассеяние быстрых частиц. Приближение эйконала	166	731
§ 5. Рассеяние частиц со спином	167	744
§ 6. Аналитические свойства и унитарность амплитуды рассеяния	170	754
§ 7. Рассеяние составных частиц. Неупругие столкновения	172	762
Глава 14. Квантовая теория излучения	176	789
§ 1. Излучение фотонов	180	789
§ 2. Рассеяние фотонов. Излучение фотонов	182	799
Глава 15. Релятивистские волновые уравнения	183	818
§ 1. Уравнение Клейна — Гордона	186	818
§ 2. Уравнение Дирака	190	845
Дополнение	869	
Список литературы	878	

ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемая книга, как и первое издание 1981 г., содержит задачи различной степени трудности в основном по нерелятивистской квантовой механике. Она адресована физикам — студентам и аспирантам, как экспериментаторам, так и теоретикам, изучающим квантовую механику по книгам Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица, Д. И. Блохинцева, А. С. Давыдова или по другим руководствам соответствующего уровня.

В задачах мы стремились уделить должное внимание как основам математического аппарата, физическим принципам и расчетным методам квантовой механики, так и иллюстрациям ее конкретных приложений — в основном к атомной физике, физике ядра и частиц — в той мере, в какой это можно сделать, не прибегая к специальным методам и представлениям этих областей физики. Ко всем задачам даны решения (при необходимости — достаточно подробные).

Для второго издания книга полностью переработана и дополнена новым материалом. Введено несколько новых разделов: частица в периодическом потенциале, квазистационарные и квазиэнергетические состояния, частица в совместном поле короткодействующего и дальнедействующего потенциалов, аналитические и унитарные свойства амплитуды рассеяния и др. Новые задачи включены и в остальные разделы. Часть из них связана с основополагающими вопросами теории адронных атомов, мезомолекулярных систем и μ -катализа, автоионизационных состояний, суперсимметрии в квантовой механике. Увеличено число более сложных — как в идейном, так и в вычислительном плане — задач, рассчитанных на

студентов, начинающих специализироваться по теоретической физике, с целью выработки у них профессиональных навыков. Для удобства пользования книгой каждой главе предпослано краткое введение, а также составлено небольшое математическое дополнение. Для высвобождения объема под новый материал нам пришлось опустить некоторые задачи из первого издания (в частности, исключен материал § 1 расформированной главы 16). И хотя мы старались сделать это за счет задач методического характера, такое сокращение в ряде случаев было сделано не без сожаления.

Переработка книги выполнена после безвременной кончины В. М. Галицкого. Однако идеи значительного числа новых задач, включенных во второе издание, обсуждались совместно всеми авторами еще в процессе работы над рукописью первого издания книги.

Мы хотели бы выразить искреннюю благодарность С. Т. Беляеву и В. Г. Соловьеву за доброжелательные замечания по рукописи книги, а также В. Д. Муру и В. С. Попову за полезные дискуссии по разнообразным вопросам квантовой теории. Мы признательны многочисленным друзьям-коллегам по кафедре теоретической физики МИФИ.

*Б. М. Карнаков
В. И. Коган*

ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

у. Ш. — уравнение Шрёдингера

в. ф. — волновая функция

с. ф. — собственная функция

с. з. — собственное значение

д. с. — дискретный спектр

с. ц. и. — система центра инерции

$\hat{}$ — символ оператора (матрицы), однако над операторами умножения он, как правило, не ставится

\propto — знак пропорциональности

\sim — знак порядка величины

$\langle m | \hat{f} | n \rangle \equiv f_{mn} \equiv f_n^m \equiv \int \Psi_m^* \hat{f} \Psi_n d\tau$ — матричный элемент оператора \hat{f}

\bar{f} , $\langle f \rangle$ — среднее значение величины f

$[\hat{f}, \hat{g}]$ — коммутатор операторов \hat{f} и \hat{g}

По двум одинаковым («немым») векторным или спинорным индексам подразумевается выполнение суммирования.

НАИБОЛЕЕ ЧАСТО ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

Смысл используемых обозначений поясняется либо в условии либо в решении каждой задачи. Однако имеется ряд величин встречающихся во многих задачах, для которых мы старались придерживаться стандартных обозначений. *Обозначения таких величин во всех случаях, когда это не может привести к недоразумениям, в тексте не поясняются.*

$\Psi_f(q)$ — при такой записи волновой функции q обозначает совокупность переменных используемого представления, а f — собственные значения соответствующих физических величин или квантовые числа рассматриваемого состояния

$\Psi_n^{\text{осц}}$ — с. ф. линейного осциллятора, см. (II.2)

- e — заряд частицы¹⁾
 c — скорость света
 \hat{H} — гамильтониан
 E, e — энергия
 \mathcal{E}, \mathcal{H} — напряженности электрического и магнитного полей
 A — векторный потенциал
 U — потенциальная энергия
 \hat{V} — оператор возмущения
 d, d — дипольный момент
 φ, A_0 — скалярный потенциал
 a_0, a_B — боровский радиус
 δ_l — фазовый сдвиг
 $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули
 w, W — вероятность перехода, вероятность перехода в единицу времени
 Z, Ze — заряд ядра
 R — радиус потенциала
 m, M — масса, магнитное квантовое число
 μ — масса, магнитный момент
 p, P — импульс
 k — волновой вектор
 A — массовое число ядра
 ω — частота
 l, L, j, J — момент (орбитальный и полный)
 s, S — спин
 $J_\nu(z)$ — функция Бесселя
 $H_n(x)$ — полином Эрмита
 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — шаровая функция
 $\Gamma(z)$ — гамма-функция
 $\delta(x), \delta(r)$ — δ -функция Дирака
 δ_{ik} — единичный тензор, символ Кронекера
 ϵ_{ikl} — антисимметричный единичный псевдотензор

Формулы теоретических введений в начале каждой главы нумеруются римскими цифрами.

УНИВЕРСАЛЬНЫЕ КОНСТАНТЫ

Решение ряда задач предполагает проведение числовых расчетов. Для удобства вычислений ниже приведены значения некоторых физических величин.

Постоянная Планка $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-27}$ эрг · с

Элементарный заряд $e = 4,80 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ

¹⁾ Но если речь идет о конкретной реальной частице (электроне, протоне, атомном ядре и т. д.), то e обозначает элементарный заряд $e \approx 4,80 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ (так что заряд электрона равен $-e$, протона $+e$, ядра Ze и т. д.).

Масса электрона $m_e = 9,11 \cdot 10^{-28}$ г

Скорость света $c = 3,00 \cdot 10^{10}$ см/с

Боровский радиус (ат. ед. длины) $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8}$ см

Атомная единица энергии $m_e e^4 / \hbar^2 = 4,36 \cdot 10^{-11}$ эрг =
= 27,21 эВ

Атомная единица частоты $m_e e^4 / \hbar^3 = 4,13 \cdot 10^{16}$ с⁻¹

Атомная единица напряженности электрического поля $e/a_0^2 =$
= $5,14 \cdot 10^9$ В/см

Постоянная тонкой структуры $\alpha = e^2 / \hbar c = 1/137$

Масса протона $m_p = 1836 m_e = 1,67 \cdot 10^{-24}$ г

Разность масс нейтрона и протона $m_n - m_p \approx 2,5 m_e$

Энергия покоя электрона $m_e c^2 = 0,511$ МэВ ,

1 эВ = $1,60 \cdot 10^{-12}$ эрг

ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Математический аппарат квантовой механики тесно связан с теорией линейных операторов. Одно из ее положений состоит в сопоставлении физическим величинам (*наблюдаемым*) эрмитовых, или самосопряженных, операторов, действующих в пространстве волновых функций (*векторов состояний*) Ψ , описывающих состояния физической системы.

В общем случае произвольному линейному оператору \hat{L} , задающему соответствие между функциями, $\Phi(q) = \hat{L}\Psi(q)$, можно сопоставить оператор \hat{L}^+ эрмитово сопряженный \hat{L} , определяемый соотношением

$$\begin{aligned} \langle \Psi_2 | \hat{L} | \Psi_1 \rangle &\equiv \int \Psi_2^*(q) \hat{L} \Psi_1(q) d\tau_q = \\ &= \int (\hat{L}^+ \Psi_2(q))^* \Psi_1(q) d\tau_q \equiv \langle \hat{L}^+ \Psi_2 | \Psi_1 \rangle \quad (1.1) \end{aligned}$$

(при некоторых ограничениях на функции $\Psi_{1,2}$). Если $\hat{L}^+ = \hat{L}$, то оператор называют *эрмитовым* (*самосопряженным*)¹⁾.

В вопросах сопоставления свойств физической величины f и соответствующего ей самосопряженного квантовомеханического оператора \hat{f} важную роль играют понятия, связанные с уравнением на собственные функции и собственные значения этого

¹⁾ Строго говоря, понятия эрмитовости и самосопряженности не совпадают, см. по этому поводу 1.29.

оператора:

$$\hat{f}\Psi_{f_n} = f_n\Psi_{f_n}. \quad (I. 2)$$

Спектр собственных значений f_n , являющихся вещественными, определяет те значения величины f , которые она только и может принимать. При этом собственные функции Ψ_{f_n} описывают состояния системы с определенным, равным f_n значением физической величины f (в случае произвольного состояния она не имеет определенного значения). Эти функции, отвечающие различным собственным значениям, взаимно ортогональны и образуют полную систему. Последнее свойство обеспечивает возможность разложения волновой функции $\Psi(q)$ произвольного состояния в ряд по собственным функциям:

$$\Psi = \sum_n c(f_n) \Psi_{f_n}, \quad (I. 3)$$

где

$$c(f_n) = \langle \Psi_{f_n} | \Psi \rangle \equiv \int \Psi_{f_n}^*(q) \Psi(q) d\tau_q. \quad (I. 4)$$

Здесь²⁾ (как и часто специально не оговариваясь в дальнейшем), предполагается, что с. ф. Ψ_{f_n} выбраны ортонормированными, причем они нормированы на единицу для дискретных с. з. и на δ -функцию — $\delta(f - f')$ — в непрерывной части спектра. Если волновая функция рассматриваемого состояния также выбрана нормированной на 1³⁾, т. е. $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$, то коэффициенты $c(f_n)$ непосредственно определяют вероятности $w(f_n) = |c(f_n)|^2$ значений f_n величины f в этом состоянии (плотность вероятности — в непрерывной части спектра с. з.). При этом среднее зна-

²⁾ Ради краткости разложение по с. ф. записано в виде суммы. В общем случае его следовало бы писать в виде двух «слагаемых»: суммы по с. ф., отвечающим дискретным с. з., и интеграла по с. з. непрерывного спектра. Аналогично говорится о полной системе с. ф. Ψ_{f_n} , хотя более точно следовало бы говорить о собственных функциях совокупности операторов, образующих *полный набор*.

³⁾ В. ф. Ψ любого физически реализуемого состояния должна быть квадратично интегрируемой. Ненормируемые на 1 собственные функции непрерывной части спектра с. з. сами по себе не описывают реальных физических состояний (они описываются *волновыми пакетами*, составленными из таких с. ф.).

чение $\bar{f} = \sum_n f_n \omega(f_n)$ физической величины может быть рассчитано по квантовомеханической формуле

$$\bar{f} = \langle \Psi | \hat{f} | \Psi \rangle \equiv \int \Psi^*(q) \hat{f} \Psi(q) d\tau_q, \quad (I. 5)$$

не требующей предварительного вычисления вероятностей.

Если эрмитов оператор $\hat{f}(\lambda)$ зависит от некоторого вещественного параметра λ , то для производной от с. з. $f_n(\lambda)$ в дискретной части спектра справедливо соотношение

$$\partial f_n(\lambda) / \partial \lambda = \langle \Psi_{f_n}(\lambda) | \partial \hat{f} / \partial \lambda | \Psi_{f_n}(\lambda) \rangle, \quad (I. 6)$$

имеющее многочисленные приложения.

§ 1. Основные понятия теории линейных операторов

1.1. Рассмотреть следующие операторы ($-\infty < x < +\infty$):

1) отражения \hat{I} : $\hat{I}\Psi(x) \equiv \Psi(-x)$;

2) сдвига \hat{T}_a : $\hat{T}_a\Psi(x) \equiv \Psi(x+a)$;

3) изменения масштаба \hat{M}_c : $\hat{M}_c\Psi(x) \equiv \sqrt{c} \Psi(cx)$, $c > 0$;

4) комплексного сопряжения \hat{K} : $\hat{K}\Psi(x) \equiv \Psi^*(x)$;

5) перестановки координат двух частиц \hat{P}_{12} :

$\hat{P}_{12}\Psi(x_1, x_2) \equiv \Psi(x_2, x_1)$.

Являются ли эти операторы линейными? Найти вид операторов, которые по отношению к ним являются: а) эрмитово сопряженными, б) обратными.

1.2. Операторы \hat{A} и \hat{B} эрмитовы, \hat{L} — произвольный линейный оператор⁴⁾. Показать эрмитовость следующих операторов:

1) $\hat{L} + \hat{L}$ и $\hat{L}\hat{L}^+$; 2) $\hat{L} + \hat{L}^+$; 3) $i(\hat{L} - \hat{L}^+)$;

4) $\hat{L}\hat{A}\hat{L}^+$; 5) $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$; 6) $i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$.

⁴⁾ В дальнейшем все рассматриваемые операторы предполагаются линейными и термин «линейный» для краткости опускается.

1.3. Показать, что произвольный оператор \hat{L} можно представить в виде $\hat{L} = \hat{A} + i\hat{B}$, где \hat{A} и \hat{B} — эрмитовы операторы.

1.4. Выразить коммутаторы $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]$ и $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$ через $[\hat{A}, \hat{B}]$, $[\hat{A}, \hat{C}]$, $[\hat{B}, \hat{C}]$.

1.5. Могут ли две матрицы \hat{P} и \hat{Q} конечного ранга удовлетворять каноническому коммутационному соотношению $[\hat{P}, \hat{Q}] = -i\hbar \hat{I}$?

1.6. Предполагая λ малой величиной, найти разложение оператора $(\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1}$ по степеням λ .

1.7. Оператор вида $\hat{F} = F(\hat{f})$, где $F(z)$ — функция z , разложимая в ряд $F(z) = \sum_n c_n z^n$, следует понимать как оператор, равный $\hat{F} = \sum_n c_n \hat{f}^n$. Используя это определение, найти явный вид следующих операторов:

- 1) $\exp(ia\hat{I})$;
- 2) $\hat{T}_a \equiv \exp(ad/dx)$;
- 3) $\hat{L}_a \equiv \exp(ax d/dx)$,

где a — вещественный параметр, \hat{I} — оператор отражения. В связи с данной задачей см. 1.24, а также 1.8 и 1.57.

1.8. Каков явный вид оператора $\hat{T}(g(x)) \equiv \exp(g(x)d/dx)$, где $g(x)$ — некоторая функция x ? Рассмотреть частные случаи: а) $g = ax$; б) $g = a^3/3x^2$.

1.9. Показать, что имеет место равенство

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \text{Sp}(\exp(\lambda\hat{A} + \hat{B})) = \text{Sp}(\hat{A} \exp(\lambda\hat{A} + \hat{B})),$$

где \hat{A} , \hat{B} — произвольные матрицы (одного и того же ранга). Существенно ли взятие следа матриц в этом соотношении?

1.10. Показать, что в случае, когда коммутатор операторов \hat{A} и \hat{B} является числом: $[\hat{A}, \hat{B}] = ic$, справедливо соотношение

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = (\exp \hat{A})(\exp \hat{B}) \exp(-ic/2).$$

1.11. В общем случае линейный оператор \hat{L} можно рассматривать как линейный интегральный оператор,

т. е.

$$\Phi(\xi) = \hat{L}\Psi(\xi) \equiv \int L(\xi, \xi') \Psi(\xi') d\xi',$$

где $L(\xi, \xi')$ — ядро оператора \hat{L} (ξ — совокупность переменных используемого представления). Как ядро $L^+(\xi, \xi')$ оператора \hat{L}^+ связано с ядром оператора \hat{L} ? Найти ядра операторов \hat{I} , \hat{T}_a , \hat{M}_c , $\hat{x} \equiv x$, $\hat{p} \equiv -i\hbar d/dx$ (по поводу \hat{I} , \hat{T}_a , \hat{M}_c см. 1.1).

1.12. Какой вид имеет ядро $L(x, x')$ оператора \hat{L} , если этот оператор коммутирует с оператором: а) координаты $\hat{x} \equiv x$, б) импульса $\hat{p} \equiv -i\hbar d/dx$?

Показать, что оператор \hat{L} , коммутирующий как с \hat{x} , так и с \hat{p} , кратен единичному, т. е. $\hat{L} \equiv L_0 \equiv \text{const}$.

§ 2. Собственные функции, собственные значения, средние

1.13. В состоянии частицы с волновой функцией

$$\Psi(x) = C \exp[ip_0 x/\hbar - (x - x_0)^2/2a^2],$$

где p_0 , x_0 , a — вещественные параметры, найти распределение вероятностей различных значений координаты. Определить средние значения и флуктуации координаты и импульса частицы.

1.14. Найти связь между средними значениями координаты и импульса частицы в двух состояниях, волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 которых связаны соотношением

$$\text{а) } \Psi_2(x) = \Psi_1(x + a); \quad \text{б) } \Psi_2(x) = \exp(ip_0 x/\hbar) \Psi_1(x).$$

1.15. Показать, что средние значения эрмитовых операторов $\hat{L}^+ \hat{L}$ и $\hat{L} \hat{L}^+$ в произвольном состоянии неотрицательны.

1.16. Показать, что среднее значение дипольного момента системы заряженных частиц в состоянии, характеризующемся определенной четностью, равно нулю.

1.17. Эрмитов оператор \hat{f} удовлетворяет соотношению

$$\text{а) } \hat{f}^2 = c^2; \quad \text{б) } \hat{f}^2 = c\hat{f}; \quad \text{в) } \hat{f}^3 = c^2\hat{f},$$

где c — вещественный параметр. Каковы собственные значения такого оператора?

1.18. Найти собственные функции и собственные значения физической величины, представляющей линейную комбинацию одноименных компонент импульса и координаты частицы: $\hat{f} = \alpha \hat{p} + \beta \hat{x}$. Убедиться в ортогональности полученных функций и нормировать их соответствующим образом.

1.19. То же, что и в предыдущей задаче, для эрмитова оператора \hat{F} , ядро которого имеет вид ⁵ $F(x, x') = f(x)f^*(x')$ (см. 1.11). Каковы кратности вырождения собственных значений?

1.20. Решить задачу на собственные функции и собственные значения оператора комплексного сопряжения \hat{K} (см. 1.1).

1.21. Эрмитов оператор (матрица) \hat{f} имеет N различных собственных значений. Показать, что оператор \hat{f}^N линейно выражается через операторы $\hat{1}, \hat{f}, \dots, \hat{f}^{N-1}$. В качестве иллюстрации рассмотреть оператор отражения \hat{I} .

1.22. Найти вид оператора $\check{F} = F(\hat{f})$, где \hat{f} — эрмитов оператор, $F(z)$ — произвольная функция, в случае когда оператор \hat{f} имеет N различных собственных значений. Рассмотреть, в частности, случаи $N = 2$ и $N = 3$, причем в последнем считать спектр собственных значений состоящим из величин $0, \pm f_0$.

1.23. Доказать соотношение (1.6).

1.24. Какой смысл можно придать оператору вида $\hat{F} = F(\hat{f})$, где $F(z)$ — произвольная функция переменной z , \hat{f} — эрмитов оператор? Насколько существенно предположение об эрмитовости \hat{f} ? В качестве иллюстрации рассмотреть оператор $1/\sqrt{-\Delta}$, где Δ — лапласиан.

1.25. Эрмитовы операторы $\hat{A}, \hat{B}, \hat{L}$ удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям: $[\hat{A}, \hat{L}] = 0, [\hat{B}, \hat{L}] = 0, [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$. Показать, что среди собственных значений оператора \hat{L} обязательно есть *вырожденные*. Привести примеры.

⁵) Операторы такого вида используются в модельных задачах атомной и ядерной физики для описания взаимодействия частиц — так называемые *сепарабельные* потенциалы (см. задачи 2.19, 2.34, 4.12). Заметим, что, не конкретизируя представления, рассматриваемый оператор можно записать в виде $\hat{F} = |f\rangle\langle f|$.

1.26. Привести примеры такой ситуации, когда в некотором состоянии: а) две физические величины, операторы которых не коммутируют, имеют одновременно определенные значения; б) из двух физических величин, операторы которых коммутируют, определенное значение имеет лишь одна.

1.27. В состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_{ab} , физические величины A и B имеют определенные значения. Что можно сказать о собственных значениях a , b этих величин, если операторы \hat{A} и \hat{B} антикоммутируют друг с другом? В качестве иллюстрации результата рассмотреть операторы \hat{x} и \hat{I} .

1.28. Найти оператор радиальной компоненты импульса \hat{p}_r (в сферических координатах). Убедиться в эрмитовости полученного оператора. Найти собственные функции и собственные значения. Вещественны ли с. з.? Ортогональны ли с. ф.? Объяснить полученные результаты. В связи с данной задачей см. также 1.29.

1.29. На примере оператора $-i\hbar d/dx$, действующего в пространстве функций, заданных на

а) всей оси $-\infty < x < \infty$;

б) конечном отрезке $a \leq x \leq b$;

в) полуоси $0 \leq x < \infty$,

обсудить вопрос о различии понятий эрмитова и самосопряженного операторов и о свойствах собственных значений и собственных функций таких операторов.

1.30. Коммутатор операторов \hat{A} и \hat{B} двух физических величин имеет вид $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, где \hat{C} — эрмитов оператор. Доказать (при некоторых ограничениях на волновые функции) справедливость соотношения неопределенности

$$\overline{(\hat{A} - \bar{A})^2} \cdot \overline{(\hat{B} - \bar{B})^2} \geq (\bar{C})^2/4,$$

где все средние значения относятся к одному и тому же состоянию системы.

Рассмотреть, в частности, операторы \hat{x} и \hat{p} и найти для них явный вид волновых функций состояний, в которых произведение неопределенностей принимает минимальное значение.

Обсудить также случай операторов \hat{l}_z и $\hat{\phi}$.

§ 3. Проекционные операторы

1.31. Проекционным называют эрмитов оператор \hat{P} , удовлетворяющий соотношению ⁶⁾ $\hat{P}^2 = \hat{P}$. Показать, что оператор $\hat{P}(f_i)$, действие которого на собственные функции оператора физической величины \hat{f} состоит в следующем ⁷⁾:

$$\hat{P}(f_i) \Psi_{f_k} = \delta_{f_i, f_k} \Psi_{f_i} = \begin{cases} \Psi_{f_i}, & f_i = f_k, \\ 0, & f_i \neq f_k, \end{cases}$$

является проекционным (так как система с. ф. Ψ_{f_k} является полной, то приведенные соотношения определяют и результат воздействия $\hat{P}(f_i)$ на произвольную функцию Ψ).

На какие состояния проектирует этот оператор? Какой физический смысл имеет среднее значение $\overline{\hat{P}(f_i)}$ в произвольном состоянии, описываемом волновой функцией Ψ ?

Как выражается через $P(f_i)$ проекционный оператор $\hat{P}(\{f\})$, проектирующий на состояния, в которых физическая величина f принимает какое-либо значение из некоторой совокупности с. з. $\{f\} = \{f_{i_1}, f_{i_2}, \dots, f_{i_N}\}$? Убедиться, что при этом $\hat{P}^2(\{f\}) = \hat{P}(\{f\})$.

Какой вид имеет проекционный оператор $\hat{P}(f_i, g_k, \dots, t_l)$, проектирующий на состояния с опре-

⁶⁾ У такого оператора с.з. равны 0 и 1. С его помощью все пространство векторов $|\Psi\rangle$ может быть «разбито» на два взаимно ортогональных подпространства: $\hat{P}|\Psi\rangle$ и $(1 - \hat{P})|\Psi\rangle$. При этом под действием P составляющая (проекция) любого вектора в первом из них не изменяется, а во втором обращается в нуль, что и определяет название его как проекционного. При этом оператор $\hat{P}' = 1 - \hat{P}$ также является проекционным и проектирует на второе из указанных подпространств.

⁷⁾ Приведенное выше соотношение относится к дискретной части спектра с.з. Обобщение на непрерывную часть спектра состоит в проектировании на некоторый конечный интервал $(f, f + \Delta f)$ с.з. согласно соотношению

$$\hat{P}(f, \Delta f) \Psi_{f'} = \begin{cases} \Psi_{f'}, & f < f' < f + \Delta f, \\ 0, & f' < f, f' > f + \Delta f. \end{cases}$$

При этом $\overline{P(f, \Delta f)}$ определяет вероятность того, что значение f заключено в рассматриваемом интервале, см. 1.32.

деленными значениями f_i, g_k, \dots, t_l физических величин, входящих в полный набор (т. е. как он связан с операторами $\hat{P}(f_i), \hat{P}(g_k), \dots$)?

1.32. Указать вид оператора, проектирующего на состояния, в которых значения координаты частицы удовлетворяют условию $x_0 \geq a$.

1.33. Найти проекционные операторы \hat{P}_\pm , проектирующие на четные \hat{P}_+ и нечетные \hat{P}_- относительно инверсии координат состояния частицы (выразить их через оператор отражения \hat{I}).

1.34. Показать, что эрмитов оператор \hat{F} , рассмотренный в задаче 1.19, может быть превращен в проекционный оператор $\hat{P} = c\hat{F}$ умножением на некоторую постоянную величину c . На какое состояние проектирует этот оператор?

1.35. Эрмитов оператор \hat{f} имеет лишь N различных собственных значений. Найти вид проекционного оператора $\hat{P}(f_i)$ для состояний с заданным значением f_i величины f .

§ 4. Элементы теории представлений.

Унитарные преобразования

1.36. Указать нормированные соответствующим образом собственные функции радиуса-вектора $\Psi_{\mathbf{r}_0}$ и импульса $\Psi_{\mathbf{p}_0}$ в \mathbf{r} - и в \mathbf{p} -представлениях.

1.37. Найти в импульсном представлении волновую функцию состояния частицы, рассмотренного в задаче 1.13.

1.38. По заданной волновой функции $\Psi(x, y, z)$ вычислить вероятность нахождения частицы в интервалах значений z от z_1 до z_2 и p_y — от p_1 до p_2 .

1.39. Найти явный вид в импульсном представлении операторов, рассмотренных в задаче 1.1.

1.40. Найти в одномерном случае вид оператора $\widehat{1/p}$ в x -представлении и оператора $\widehat{1/x}$ в p -представлении.

1.41. Установить соотношение между ядрами $L(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и $L(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ одного и того же оператора \hat{L} в \mathbf{r} - и \mathbf{p} -представлениях (см. задачу 1.11).

1.42. Найти вид операторов $\widehat{1/r}$ и $\widehat{1/r^2}$ в импульсном представлении.

1.43. Даны два эрмитовых оператора \hat{A} и \hat{B} . Указать связь между собственными функциями оператора \hat{A} в B -представлении и собственными функциями оператора \hat{B} в A -представлении. Привести примеры, иллюстрирующие полученный результат.

1.44. Какие из операторов, рассмотренных в 1.1, являются унитарными?

1.45. Унитарный оператор удовлетворяет уравнению $\hat{U}^2 = \hat{U}$. Каков его явный вид?

1.46. Оператор \hat{U} унитарный. В каком случае оператор $\hat{U}' = c\hat{U}$, где c — некоторое число, также является унитарным?

1.47. Показать, что произведение $\hat{U}_1\hat{U}_2$ двух унитарных операторов также является унитарным оператором.

1.48. Может ли унитарный оператор (матрица) являться одновременно и эрмитовым? Привести примеры.

1.49. Показать, что эрмитова и антиэрмитова части произвольного унитарного оператора коммутируют друг с другом, так что унитарный оператор может быть диагонализирован. Каким свойством обладают его собственные значения (сравнить с 1.50)?

1.50. Показать, что оператор вида $\hat{U} = \exp(i\hat{F})$ является унитарным, если \hat{F} — эрмитов оператор. Записать в таком виде унитарные операторы \hat{I} , \hat{T}_a , \hat{M}_c из 1.1.

1.51. Квадратные матрицы \hat{A} и \hat{A}' одного ранга связаны унитарным преобразованием $\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+$. Показать, что шпур и детерминанты этих матриц одинаковы.

1.52. Доказать соотношение

$$\det \|\exp \hat{A}\| = \exp(\text{Sp } \hat{A}),$$

где \hat{A} — эрмитова матрица.

1.53. Чем примечателен детерминант унитарной матрицы? Найти его для матрицы вида $\hat{U} = \exp(i\hat{F})$, где \hat{F} — эрмитова матрица. Показать, что преобразованием вида $\hat{U}' = c\hat{U}$ унитарную матрицу можно сделать *унимодулярной*, т. е. такой, что $\det \hat{U}' = 1$.

1.54. Сколько имеется независимых квадратных матриц ранга N , которые являются: а) эрмитовыми;

б) унитарными? Каково число унимодулярных унитарных матриц ранга N ?

1.55. Показать, что при унитарных преобразованиях операторов $\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+$ алгебраические соотношения между операторами вида

$$F(\hat{A}_i) \equiv c_0 + \sum_i c_i \hat{A}_i + \sum_{i,k} c_{ik} \hat{A}_i \hat{A}_k + \dots = 0$$

сохраняют свой вид, т. е. $F(\hat{A}'_i) = 0$.

1.56. Найти закон преобразования операторов \hat{x} и \hat{p} при унитарных преобразованиях, осуществляемых операторами: а) отражения \hat{I} ; б) сдвига \hat{T}_a ; в) изменения масштаба \hat{M}_c . Операторы \hat{I} , \hat{T}_a , \hat{M}_c введены в 1.1.

1.57. Совокупность операторов $\hat{U}(a)$, зависящих от непрерывного вещественного параметра a , обладает свойствами $\hat{U}(0) = \hat{I}$ и $\hat{U}(a_3) = \hat{U}(a_1)\hat{U}(a_2)$, если $a_3 = a_1 + a_2$. Показать, что \hat{U} имеет вид $\hat{U}(a) = \exp(ia\hat{F})$, где \hat{F} (так называемый *инфинитезимальный* оператор) определяет вид $\hat{U}(\delta a)$ при бесконечно малом δa согласно формуле $\hat{U}(\delta a) \approx 1 + i\hat{F}\delta a$. В качестве иллюстрации рассмотреть связь операторов \hat{T}_a и \hat{M}_c (см. 1.1) с операторами соответствующих бесконечно малых преобразований.

Г л а в а 2

ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

Стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\Psi_E \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \Psi_E(x) = E\Psi_E(x) \quad (\text{II. 1})$$

с соответствующими граничными условиями (ограниченность волновой функции, обращение ее в нуль на непроницаемых потенциальных стенках и др.) определяет энергетический спектр частицы в потенциале $U(x)$ и волновые функции стационарных состояний.

Спектр E_n в области энергий $\min U(x) < E_n < U(\pm\infty)$ (в которой согласно классической механике частица может совершать только финитное дви-

жение), является дискретным¹⁾. Эти уровни E_n являются невырожденными, а соответствующие собственные функции $\Psi_n(x)$ — квадратично интегрируемыми (т. е. они описывают локализованные состояния частицы в согласии с финитным характером движения в классической теории).

Для линейного осциллятора $U(x) = kx^2/2$, $\omega = \sqrt{k/m}$ решение уравнения Шрёдингера дает спектр $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ и с. ф.

$$\Psi_n^{\text{осц}}(x) = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) H_n\left(\frac{x}{a}\right), \quad (\text{II. 2})$$

где $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$, $H_n(z)$ — полиномы Эрмита; так $H_0(z) = 1$, $H_1(z) = 2z$, $H_2(z) = 4z^2 - 2$ и т. д. Приведем также для осциллятора матричные элементы координаты

$$x_{n, n+1} = x_{n+1, n} = \sqrt{(n+1)/2} a, \quad (\text{II. 3})$$

остальные равны нулю; матричные элементы оператора импульса связаны с ними соотношением $p_{nk} = im\omega x_{nk}$, причем $\omega_{nk} = \pm\omega$ для $n = k \pm 1$.

В области $E > \min U(\pm\infty)$ спектр является непрерывным. Значения энергии $E > \max U(\pm\infty)$ (для которых в классической механике возможно инфинитное движение в обоих направлениях: как при $x \rightarrow -\infty$, так и $x \rightarrow +\infty$) являются двукратно вырожденными. При этом в качестве независимых решений у. Ш. (II. 1) обычно рассматриваются такие, которые связаны с физической задачей об отражении частиц потенциалом и однозначно определяются видом асимптотики в. ф. при $x \rightarrow \pm\infty$; так, в случае частиц, падающих на силовой центр слева²⁾

$$\Psi_{k_1}^{(+)}(x) \approx \begin{cases} e^{ik_1x} + A(E)e^{-ik_1x}, & x \rightarrow -\infty, \\ B(E)e^{ik_2x}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (\text{II. 4})$$

где $k_{1,2} = \sqrt{2m(E - U(\mp\infty))/\hbar^2}$. Амплитуды $A(E)$,

¹⁾ Мы используем такую нумерацию уровней д. с. E_n и с. ф. Ψ_n , при которой основному состоянию отвечает значение $n = 0$. При этом n совпадает с числом нулей с. ф. $\Psi_n(x)$, не считая нулей при $x \rightarrow \pm\infty$ (или на непроницаемых потенциальных стенках). Аналогичный смысл имеет радиальное квантовое число n_r состояний д. с. частицы в центральном потенциале.

²⁾ Физически реализуемая ситуация описывается волновыми пакетами из таких с. ф.; см. в связи с этим задачи 6.7, 6.8.

$B(E)$ определяют коэффициенты прохождения $D(E) = (k_2/k_1) |B|^2$ и отражения $R(E) = |A|^2$ частиц. Эти коэффициенты обладают следующими свойствами:

$$\begin{aligned} D(E) + R(E) &= 1; & D_+(E) &= D_-(E); \\ D(E) &\rightarrow 1 \text{ при } E \rightarrow \infty; \\ D(E) &\rightarrow 0 \text{ при } E \rightarrow \max U (\mp \infty). \end{aligned} \quad (\text{II. 5})$$

Второе из них, $D_+(E) = D_-(E)$, выражает независимость значения коэффициента прохождения при заданной энергии E от направления падения частиц, слева или справа, на силовой центр; о последнем из свойств см. задачи 2.37 и 2.39.

Своеобразными свойствами³⁾ обладает энергетический спектр частицы в пространственно периодическом потенциале; некоторые из них рассмотрены в задачах из § 4.

§ 1. Стационарные состояния дискретного спектра

2.1. Найти энергетические уровни и нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a (т. е. в потенциале $U(x) = 0$ при $0 < x < a$ и $U(x) = \infty$ при $x < 0$ и $x > a$). Определить в таких состояниях средние значения и флуктуации координаты и импульса частицы.

В состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi = Ax(x-a)$ (при $0 < x < a$), найти распределение вероятностей различных значений энергии частицы и ее среднее значение.

2.2. Найти изменение энергетических уровней и волновых функций стационарных состояний заряженного линейного осциллятора при наложении на него однородного электрического поля, направленного вдоль оси колебаний. Каковы *поляризуемости*⁴⁾ стационарных состояний осциллятора?

³⁾ Укажем также на своеобразие энергетического спектра и свойств с. ф. гамильтоннана при движении в магнитном поле, см. 7.1.

⁴⁾ Напомним, что поляризуемость β определяет средний дипольный момент, $\mathbf{d} \approx \beta \mathcal{E}$, индуцируемый слабым внешним электрическим полем; она же определяет квадратичную часть, $\Delta E = -\beta \mathcal{E}^2/2$, сдвига энергетического уровня в таком поле.

2.3. Вычислив среднее значение энергии $\bar{E}(\alpha)$ в состоянии с волновой функцией $\Psi(x, \alpha) = \sqrt{\alpha} \exp(-\alpha|x|)$, $\alpha > 0$, показать, что в любом одномерном⁵⁾ потенциале $U(x)$, удовлетворяющем условиям $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$ и $\int U(x) dx < 0$, всегда имеется хотя бы одно состояние дискретного спектра с энергией $E_0 < 0$ (так что такой потенциал всегда может «связать» частицу; отметим, что при этом не требуется выполнения более жесткого условия $U(x) \leq 0$ при всех значениях x).

2.4. Обозначим через E_n и \tilde{E}_n значения n -го уровня энергии дискретного спектра в полях $U(x)$ и $\tilde{U}(x)$, связанных условием $\tilde{U}(x) = U(x) + \delta U(x)$, где $\delta U(x) \geq 0$. Показать, что $\tilde{E}_n \geq E_n$ (этот результат непосредственно переносится на случай системы с произвольным числом степеней свободы).

2.5. Найти соответствие между энергетическими уровнями дискретного спектра и нормированными

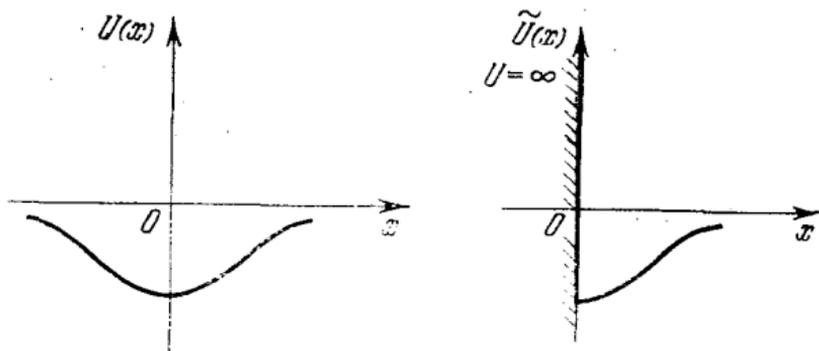


Рис. 1

волновыми функциями стационарных состояний частицы в потенциалах $U(x)$ и $\tilde{U}(x)$, связанных между собой следующим образом: $\tilde{U}(x) = U(x)$ при $x > 0$ и $\tilde{U}(x) = \infty$ при $x < 0$, причем потенциал $U(x)$ симметричен (рис. 1).

2.6. Потенциал имеет такой вид $U(x) = \tilde{U}(x) + \alpha \delta(x - x_0)$, где $\tilde{U}(x)$ — ограниченная функция. Как ведут себя решение $\Psi_E(x)$ уравнения Шрёдингера и его производная в точке x_0 ?

2.7. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции состояний дискретного спектра час-

⁵⁾ Сравнить с результатами задач 4.21, 4.33.

тицы в δ -потенциале ⁶⁾ $U(x) = -\alpha\delta(x)$, рис. 2. Найти средние значения кинетической и потенциальной энергии в этих состояниях. Вычислить произведение неопределенностей координаты и импульса. Каков вид волновой функции в импульсном представлении?

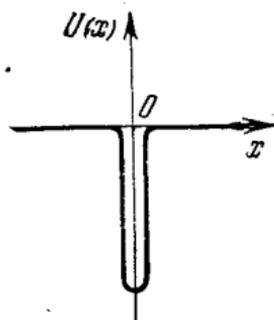


Рис. 2

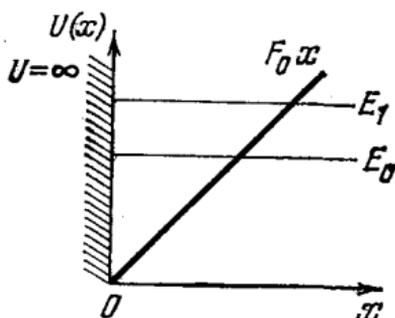


Рис. 3

2.8. Найти энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний частицы в потенциале, указанном на рис. 3.

2.9. Найти энергетические уровни дискретного спектра и соответствующие волновые функции частицы в потенциале $U(x) = U_0(e^{-2x/a} - be^{-x/a})$, причем $U_0 > 0$, $a > 0$, $b > 0$.

Указание. При решении у. Ш. сделать замену переменной $z = 2\beta e^{-x/a}$ и перейти к новой функции $w(z)$ согласно $\Psi = z^{\kappa a} e^{-z/2} w(z)$, где $\kappa = (-2mE/\hbar^2)^{1/2}$, $\beta = (2mU_0 a^2/\hbar^2)^{1/2}$.

2.10. То же, что и в предыдущей задаче, для потенциала

$$U(x) = U_1/(1 + e^{x/a})^2 - U_2/(1 + e^{x/a}); \quad U_{1,2} > 0, \quad a > 0.$$

Для решения уравнения Шрёдингера сделать замену переменной $z = -e^{x/a}$ и подстановку $\Psi = (1 - z)^{-\epsilon} z^{\mu} w(z)$ (при соответствующем выборе параметров ϵ и μ у. Ш. сводится к гипергеометрическому уравнению).

⁶⁾ В одномерном случае δ -потенциал притяжения моделирует мелкую потенциальную яму $U(x)$ (достаточно произвольного вида), для которой $ma^2 U_0/\hbar^2 \ll 1$; U_0 , a — характерные величина потенциала и его радиус, при этом $-\alpha = \int U(x) dx < 0$. В связи с данной задачей см. также 2.17, 2.20, 2.23.

2.11. Найти энергетический спектр в потенциале вида: $U(x) = \alpha\delta(x)$, $\alpha > 0$ при $|x| < a$ и $U = \infty$ при $|x| > a$ (рис. 4). Показать, что при выполнении условия $m\alpha a/\hbar^2 \gg 1$ нижняя часть спектра состоит из последовательности пар близко расположенных уровней.

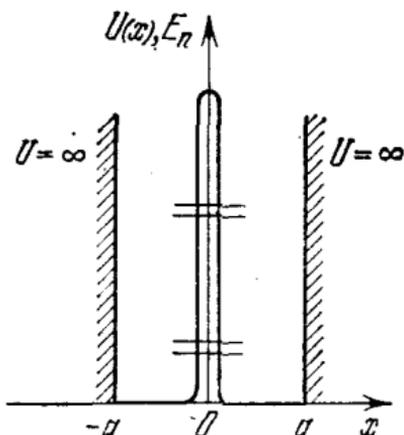


Рис. 4

Каков спектр сильно возбужденных состояний частицы? Какова картина энергетических уровней при $\alpha < 0$?

2.12. Обобщить результат предыдущей задачи на случай, когда δ -барьер разделяет прямоугольную яму несимметричным образом.

2.13. Исследовать поведение решения уравнения Шрёдингера при $x \rightarrow \pm\infty$ в случае $E = 0$ для потенциала, удовлетворяющего условию $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$.

Показать, что не возрастающее как при $x \rightarrow +\infty$, так и при $x \rightarrow -\infty$ решение $\Psi_{E=0}(x)$ уравнения Шрёдингера существует только при *исключительных* значениях параметров потенциала, отвечающих условиям появления новых состояний дискретного спектра при углублении потенциала.

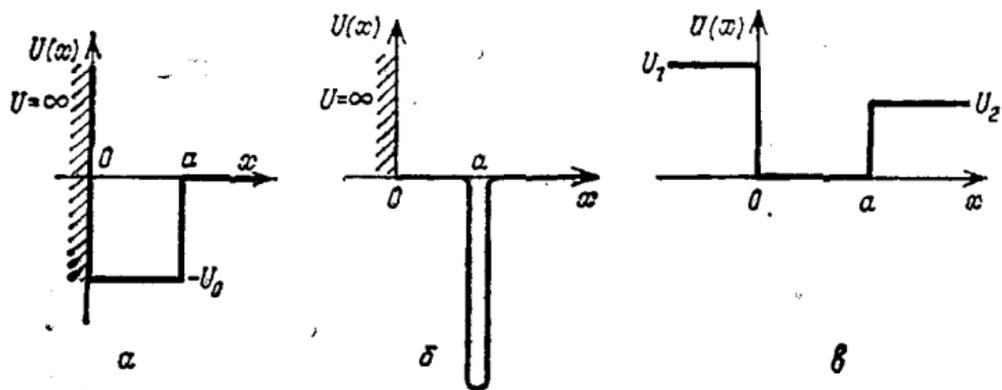


Рис. 5

Каково число дискретных уровней частицы, находящейся: а) в прямоугольной потенциальной яме глубины U_0 и ширины a ; б) в потенциале $U = -\alpha\delta(x) - \alpha\delta(x-a)$, в зависимости от значений параметров потенциала?

2.14. Для частицы в потенциале $U(x)$ вида:
 а) $U = \infty$ при $x < 0$, $U = -U_0$ при $0 < x < a$,
 $U = 0$ при $x > a$; б) $U = \infty$ при $x < 0$, $U =$
 $= -\alpha\delta(x-a)$ при $x > 0$ (рис. 5, а, б), найти число
 связанных состояний в зависимости от значений па-
 раметров потенциала.

2.15. Найти условие существования связанных со-
 стояний частицы в потенциальной яме, изображен-
 ной на рис. 5, в. Рассмотреть предельные случаи:
 а) $U_1 = \infty$, б) $U_1 = U_2$.

2.16. Частица нахо-
 дится в поле, имеющем
 вид двух одинаковых
 симметричных потен-
 циальных ям, распо-
 ложенных на некото-
 ром расстоянии друг от друга

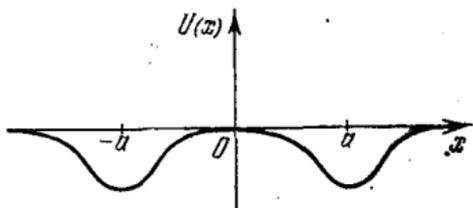


Рис. 6

(рис. 6); области действия ям не перекрываются,
 так что $U(0) = 0$. Показать, что средняя сила,
 с которой частица действует на ямы в стацио-
 нарных состояниях дискретного спектра, приводит
 к взаимному притяжению ям в четных состояниях
 и к их взаимному отталкиванию в нечетных состоя-
 ниях.

§ 2. Уравнение Шрёдингера в импульсном представлении. Функция Грина уравнения Шрёдингера.

Интегральная форма уравнения Шрёдингера

2.17. Найти в импульсном представлении вид ста-
 ционарного уравнения Шрёдингера в случае потен-
 циала $U(x)$, обращающегося в нуль при $x \rightarrow \pm\infty$.
 На основе этого уравнения исследовать состояния
 дискретного спектра в потенциале $U = -\alpha\delta(x)$ и
 сравнить с результатом 2.7.

2.18. Исследовать связанные состояния частицы в
 потенциале $U = -\alpha[\delta(x-a) + \delta(x+a)]$ на основе
 уравнения Шрёдингера в импульсном представлении.

2.19. Рассмотреть связанные состояния частицы
 в случае *сепарабельного* потенциала, представляю-
 щего нелокальный интегральный оператор \hat{U} с ядром
 $U(x, x') = -\lambda f(x)f^*(x')$, исходя из решения уравне-
 ния Шрёдингера в импульсном представлении.

2.20. Найти функцию Грина $G_E(x, x')$ уравнения Шрёдингера для свободной частицы при $E < 0$, убывающую при $|x - x'| \rightarrow \infty$. Функция Грина удовлетворяет уравнению

$$(\hat{H} - E)G_E \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} G_E - EG_E = \delta(x - x').$$

Каков вид функции Грина в импульсном представлении?

С помощью функции Грина записать уравнение Шрёдингера для состояний дискретного спектра в потенциале $U(x)$ ($U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$) в виде интегрального уравнения. На основе этого уравнения рассмотреть связанные состояния частицы в δ -яме и сравнить с результатами задачи 2.7.

2.21. Рассмотреть задачу о связанных состояниях частицы в случае сепарабельного потенциала, см. 2.19, исходя из решения уравнения Шрёдингера в интегральной форме.

2.22. Воспользовавшись интегральной формой уравнения Шрёдингера, показать, что энергетические уровни дискретного спектра в произвольном потенциале $U(x) \leq 0$ ($U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$) удовлетворяют условию

$$|E_n| \leq \frac{m}{2\hbar^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx \right]^2.$$

2.23. В «мелкой» одномерной потенциальной яме $U(x)$, для которой $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$ (U_0, a — характерное значение потенциала и его радиус), имеется только одно связанное состояние, энергия которого приближенно равна $E_0 \approx -\frac{m}{2\hbar^2} \left[\int U(x) dx \right]^2$. Воспользовавшись интегральной формой уравнения Шрёдингера, найти поправку порядка ma^2U_0/\hbar^2 к этому выражению.

2.24. Найти функцию Грина свободной частицы, движение которой, однако, ограничено непроницаемой стенкой (т. е. $U = 0$ при $x > 0$ и $U = \infty$ при $x < 0$, рис. 7, а) для $E < 0$. Функция Грина удовлетворяет граничному условию $G_E(x = 0, x') = 0$ и убывает при $|x - x'| \rightarrow \infty$.

С помощью функции Грина записать уравнение Шрёдингера для связанных состояний частицы ($E_n < 0$) в потенциале вида, приведенного на рис. 7, б (т. е. $U = \tilde{U}(x)$ при $x > 0$ и $U = \infty$ при $x < 0$) в интегральной форме.

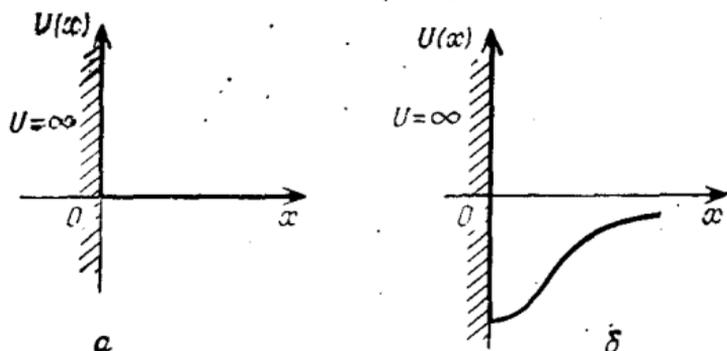


Рис. 7

2.25. Используя интегральную форму уравнения Шрёдингера, показать, что условие

$$\int_0^{\infty} x |\tilde{U}(x)| dx \geq \hbar^2/2m$$

является *необходимым* условием существования связанных состояний в потенциале $U(x)$ вида, приведенного на рис. 7, б: $U = \infty$ при $x < 0$, $U = \tilde{U}(x)$ (при этом $\tilde{U} \leq 0$ и $\tilde{U}(x) \rightarrow 0$ для $x \rightarrow \infty$) при $x > 0$.

Применить полученный результат к потенциалам: а) $\tilde{U} = -U_0$ для $x < a$, $\tilde{U} = 0$ при $x > a$; б) $\tilde{U} = -\alpha\delta(x-a)$, см. рис. 5, а, б, и сравнить с точным условием существования связанных состояний.

2.26. Найти функцию Грина $G_E(x, x')$ частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a . Обсудить аналитические свойства G_E как функции переменной E . Показать, в частности, что она имеет полюсы, и установить связь положений этих полюсов в плоскости комплексной переменной E со значениями энергетических уровней E_n частицы.

2.27. Рассмотреть потенциальные ямы различного вида $U(x)$, удовлетворяющие условиям:

$$U(x) \leq 0; \quad U(x) \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \pm \infty;$$

$$\int U(x) dx = \alpha = \text{const.}$$

Какой конкретный вид имеет потенциальная яма, в которой:

а) энергия связи основного уровня $|E_0|$ принимает максимальное значение; б) содержится наибольшее число состояний дискретного спектра?

§ 3. Состояния непрерывного спектра.

Прохождение через потенциальные барьеры

2.28. Для свободной частицы, движение которой ограничено непроницаемой стенкой (т. е. $U = 0$ при $x > 0$ и $U = \infty$ при $x < 0$, рис. 7, а), найти волновые функции стационарных состояний. Нормировать их на δ -функцию по энергии. Убедиться в полноте полученной системы функций (на интервале $0 < x < \infty$).

2.29. Определить коэффициент отражения частицы от потенциальной стенки, изображенной на рис. 8. Рассмотреть предельные случаи $E \rightarrow U_0$ и $E \rightarrow \infty$.

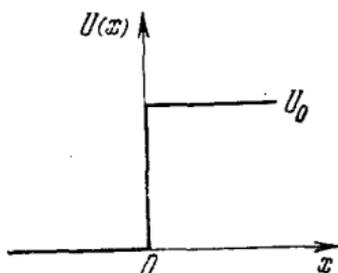


Рис. 8

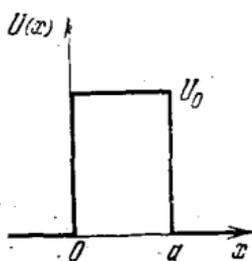


Рис. 9

2.30. Определить коэффициенты отражения и прохождения частиц в случае δ -потенциала $U = \alpha\delta(x)$.

Обсудить аналитические свойства амплитуд отраженной $A(E)$ и прошедшей $B(E)$ волн как функций комплексной переменной E . Убедиться, что точки $E = 0$ и $E = \infty$ являются точками ветвления этих функций. Проведя в плоскости комплексной переменной E разрез от точки $E = 0$ вдоль вещественной полуоси $E > 0$, найти особенности функций $A(E)$ и $B(E)$ на первом, так называемом *физическом*, и других листах их римановой поверхности (физический лист фиксируется условием, что фаза точек E на вещественной полуоси $E > 0$ сверху равна нулю). Показать, что такими особенностями являются полюсы, и установить связь между положениями полюсов и уровнями дискретного спектра.

2.31. Найти коэффициент прохождения частиц через прямоугольный потенциальный барьер, изображенный на рис. 9. Как изменяется полученное выражение при переходе к потенциальной яме ($U_0 < 0$)?

2.32. Найти значения энергий, при которых частицы не отражаются от потенциального барьера вида $U = \alpha [\delta(x) + \delta(x - a)]$, рис. 10.

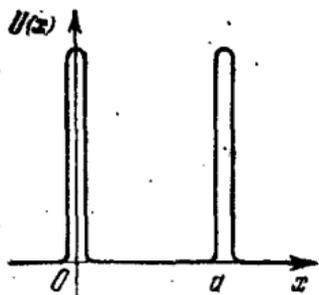


Рис. 10

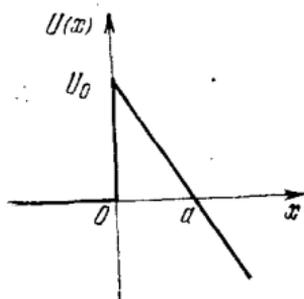


Рис. 11

2.33. Доказать независимость значения коэффициента отражения при данной энергии от направления падения частиц на потенциал.

2.24. Найти коэффициенты прохождения и отражения частицы в случае сепарабельного потенциала (см. 2.19). Убедиться, что общие свойства (II.5) этих коэффициентов сохраняются и в случае сепарабельного потенциала.

2.35. Найти коэффициент прохождения частиц через потенциальный барьер, указанный на рис. 11. Рассмотреть различные предельные случаи, допускающие наглядное восприятие полученного выражения для $D(E)$.

2.36. То же, что и в предыдущей задаче, в случае барьера $U = -F_0|x|$, рис. 12.

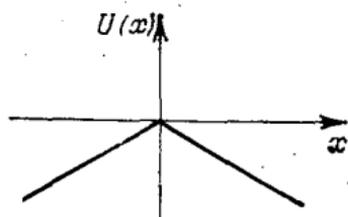


Рис. 12

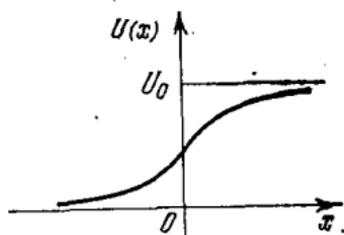


Рис. 13

2.37. Поле $U(x)$ имеет вид потенциальной ступеньки, т. е. $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow -\infty$ и $U(x) \rightarrow U_0 > 0$ при $x \rightarrow +\infty$, рис. 13. Найти энергетическую зависи-

мость коэффициента прохождения частиц при $E \rightarrow U_0$. Сравнить с результатом из 2.29.

2.38. Найти коэффициенты отражения и прохождения медленных частиц, $ka \ll 1$, в случае «слабого» поля $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$ (U_0 , a — характерная величина и радиус потенциала). Сравнить полученные выражения с результатами для δ -потенциала (см. 2.30).

2.39. Показать, что коэффициент прохождения в произвольном потенциале, удовлетворяющем условию $U(x) = 0$ для $|x| > a$, при $E \rightarrow 0$ обращается в нуль: $D(E) \propto E$. В каких исключительных случаях нарушается эта зависимость?

Выразить коэффициент c в зависимости $D = cE$ через параметры, характеризующие асимптотику решения уравнения Шрёдингера с $E = 0$. Применить полученный результат к прямоугольному барьеру (яме) и сравнить с результатом точного решения, см. 2.31.

2.40. Найти коэффициент прохождения для медленных частиц в потенциале $U = -U_0 a^4 / (x^2 + a^2)^2$.

Указание. При решении у. Ш. с $E = 0$ сделать замену переменной $z = \text{arctg}(x/a)$ и перейти к новой функции $\psi = \Psi \cdot (x^2 + a^2)^{-1/2}$.

2.41. Исходя из решения уравнения Шрёдингера в импульсном представлении, найти волновые функции стационарных состояний частицы в однородном поле $U = -F_0 x$. Нормировать их на δ -функцию по энергии и убедиться в полноте полученной системы функций.

Воспользоваться полученными результатами для определения энергетического спектра в потенциале, рассмотренном в задаче 2.8.

2.42. Найти функции Грина $G_E^{(\pm)}(x, x')$ свободной частицы при $E > 0$; индексы (\pm) указывают на характер асимптотики:

$$G_E^{(\pm)} \propto \exp(\pm i \sqrt{2mE/\hbar^2} |x - x'|) \text{ при } |x - x'| \rightarrow \infty.$$

Записать уравнение Шрёдингера в виде интегрального уравнения, решения которого описывают процесс отражения и прохождения частиц с импульсом p ($-\infty < p < +\infty$) в потенциале $U(x)$, обращаемся в нуль при $x \rightarrow \pm\infty$. На основе полученного уравнения рассмотреть случай δ -потенциала.

2.43. В случае δ -барьера, $U = \alpha \delta(x)$ с $\alpha > 0$, доказать непосредственным вычислением полноту

системы функций $\Psi_p^{(+)}(x)$, описывающих процесс отражения и прохождения частиц с импульсом p ($-\infty < p < +\infty$).

2.44. Обобщить результат предыдущей задачи на случай δ -потенциала притяжения $U = -\alpha\delta(x)$, $\alpha > 0$.

2.45. Найти функции Грина: $G_E(x, x')$ при $E < 0$ и $G_E^{(\pm)}(x, x')$ при $E > 0$ для частицы в δ -потенциале отталкивания $U = \alpha\delta(x)$, $\alpha > 0$. Обсудить их аналитические свойства как функций комплексной переменной E . Сравнить со случаем свободной частицы, см. 2.42.

2.46. То же, что и в предыдущей задаче, для δ -ямы.

2.47. Найти в импульсном представлении функцию Грина частицы в δ -потенциале $U = \alpha\delta(x)$.

§ 4. Системы с несколькими степенями свободы Частица в периодическом потенциале

2.48. Найти энергетические уровни и соответствующие волновые функции плоского изотропного осциллятора. Какова кратность вырождения уровней?

2.49. Найти энергетический спектр частицы в потенциале $U = (1/2)k(x^2 + y^2) + \alpha xy$, $|\alpha| < k$.

2.50. Найти спектр гамильтониана

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{p}_1^2 + \frac{1}{2m} \hat{p}_2^2 + \frac{1}{2} k (x_1^2 + x_2^2) + \alpha x_1 x_2, \quad |\alpha| < k.$$

2.51. Две частицы одинаковой массы находятся в одинаковом же потенциале $U(x_{1,2})$ и взаимодействуют друг с другом как «непроницаемые» точки. Найти энергетический спектр и соответствующие волновые функции такой системы, считая известным решение одночастичной задачи в потенциале $U(x)$. Рассмотреть в качестве иллюстрации случай двух частиц, находящихся в бесконечно глубокой потенциальной яме.

2.52. Обобщить результат предыдущей задачи на случай N частиц.

2.53. Для частицы в периодическом потенциале вида $U = \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$ (идеальный бесконечный «кристалл», см. рис. 14) найти систему независимых решений уравнения Шрёдингера для произвольного значения E .

Определить энергетический спектр частицы.

2.54. Найти энергетический спектр частицы в потенциале $U = \alpha \sum'_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$, где штрих у суммы означает отсутствие слагаемого с $n = 0$ («кристалл»

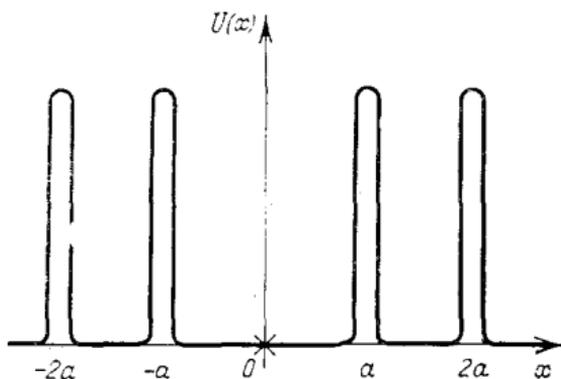


Рис. 14

с дефектом — вакансией, рис. 15). Показать, что в дополнение к разрешенным энергетическим зонам в случае идеального кристалла (см. 2.53) появляются новые дискретные уровни, соответствующие локализованным вблизи дефекта состояниям частицы.

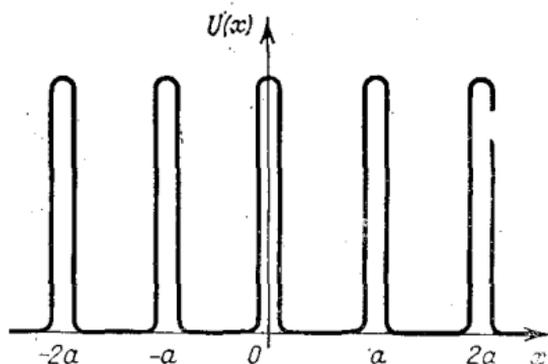


Рис. 15

2.55. Найти энергетический спектр и указать кратность вырождения уровней частицы в потенциале вида: $U = \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \delta(x - na)$ при $x > 0$ и $U = U_0 > 0$ при $x \leq 0$ (частица в полубесконечном кристалле, см. рис. 16). Сравнить со случаем идеального бесконечного кристалла (см. 2.53). Обратить внимание на

возможность существования состояний частицы, локализованных вблизи границы кристалла (так

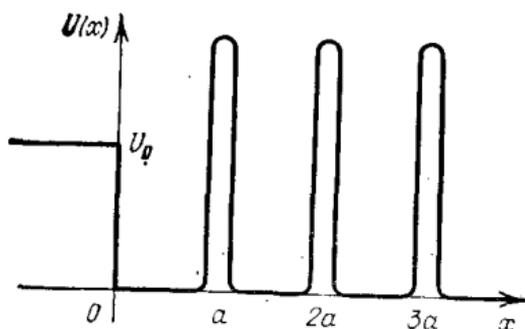


Рис. 16

называемые *поверхностные*, или *таммовские*, состояния, на возможность существования которых впервые указал И. Е. Тамм).

Г л а в а 3

МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

Операторы компонент момента импульса частицы $\hat{l}_i = [\hat{r}, \hat{p}_i]$ удовлетворяют коммутационным соотношениям¹⁾

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_k] = i\epsilon_{ikn}\hat{l}_n, \quad [\hat{l}^2, \hat{l}_i] = 0, \quad (\text{III. 1})$$

а также

$$[\hat{l}_i, \hat{x}_k] = i\epsilon_{ikn}\hat{x}_n, \quad [\hat{l}_i, \hat{p}_k] = i\epsilon_{ikn}\hat{p}_n. \quad (\text{III. 2})$$

В сферических координатах операторы \hat{l}_i содержат только угловые переменные θ, φ . Так, оператор $\hat{l}_z = -i\partial/\partial\varphi$, его с. ф. и с. з. имеют вид ($m \equiv l_z$):

$$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{III. 3})$$

Оператор квадрата момента \hat{l}^2 выражается через угловую часть оператора Лапласа; его с. з. равны $l(l+1)$, причем $l = 0, 1, 2, \dots$. При исследовании

¹⁾ Так: $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z$ и т. д. Говоря о моменте (включая в дальнейшем и спиновый момент), мы имеем в виду измерение его в единицах \hbar , так что соответствующие операторы и их с. з. безразмерны. Подчеркнем, что как соотношения (III. 1), так и (III. 8), (III. 9) справедливы для момента любой системы (или подсистемы) независимо от его природы (орбитальный, спиновый, полный).

лишь угловой зависимости волновых функций частицы операторы \hat{I}^2 и \hat{I}_z образуют полный набор. Шаровые функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ являются нормированными с. ф. этих операторов:

$$\begin{aligned}\hat{I}^2 Y_{lm} &\equiv - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y_{lm} = \\ &= l(l+1) Y_{lm}, \\ \hat{I}_z Y_{lm} &\equiv -i \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm} = m Y_{lm},\end{aligned}\quad (\text{III. 4})$$

и имеют вид ($|m| \leq l$)

$$\begin{aligned}Y_{lm} &= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^{|m|} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) \times \\ &\quad \times e^{im\varphi}, \quad (\text{III. 5}) \\ P_l^{|m|}(\cos \theta) &= \sin^{|m|} \theta d^{|m|} P_l(\cos \theta) / d(\cos \theta)^{|m|},\end{aligned}$$

где P_l и $P_l^{|m|}$ — полиномы Лежандра и присоединенные полиномы Лежандра соответственно; при этом $Y_{lm}^* = (-1)^{l-m} Y_{l, -m}$.

Шаровые функции имеют определенную четность l , равную $(-1)^l$. Для них имеет место «теорема сложения»:

$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mathbf{nn}') = \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\mathbf{n}) Y_{lm}^*(\mathbf{n}'), \quad (\text{III. 6})$$

где \mathbf{n} , \mathbf{n}' — орты вдоль соответствующих направлений, при этом

$$\begin{aligned}Y_{lm}(\mathbf{n}) &\equiv Y_{lm}(\theta, \varphi) \text{ и } \mathbf{nn}' = \cos \theta \cos \theta' + \\ &\quad + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi').\end{aligned}$$

Приведем шаровые функции для низших моментов:

$$\begin{aligned}Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta); \\ Y_{1, \pm 1} &= \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}; \\ Y_{2, \pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}; \\ Y_{2, \pm 2} &= - \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}.\end{aligned}\quad (\text{III. 7})$$

Отметим, что полезно иметь в виду возможность записи шаровых функций через декартовы координаты; так,

$$Y_{1, \pm 1} \propto \sin \theta e^{\pm i\varphi} = (x \pm iy)/r, \quad Y_{10} \propto \cos \theta = z/r \text{ и т. д.}$$

«Повышающий» (значение проекции момента на ось z) \hat{l}_+ и «понижающий» \hat{l}_- операторы, $\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$, удовлетворяют соотношениям коммутации $[\hat{l}_z, \hat{l}_{\pm}] = \pm \hat{l}_{\pm}$. Отсюда следует, что для них из матричных элементов $\langle lm' | \hat{l}_{\pm} | lm \rangle$ отличны от нуля только ²⁾

$$(l_+)_{m, m-1} = (l_-)_{m-1, m} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}. \quad (\text{III. 8})$$

Соответственно для операторов \hat{l}_x, \hat{l}_y отличны от нуля только матричные элементы:

$$(l_x)_{m, m-1} = (l_x)_{m-1, m} = 1/2 \sqrt{(l+m)(l-m+1)},$$

$$(l_y)_{m, m-1} = -(l_y)_{m-1, m} = -1/2i \sqrt{(l+m)(l-m+1)},$$
(III. 9)

чем и определяется вид этих операторов в l_z -представлении, при этом $(l_z)_{mm'} = m\delta_{mm'}$.

§ 1. Общие свойства момента

3.1. Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии плоского ротатора ³⁾ с моментом инерции I . Какова кратность вырождения уровней?

В состоянии ротатора с волновой функцией $\Psi = C \cos^2 \varphi$ найти вероятности различных значений энергии и проекции момента, а также средние значения и флуктуации этих величин.

²⁾ Для определения величины матричного элемента следует также учесть соотношение $\hat{l}^2 = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z$. Выбор фазового множителя в (III. 8) фиксирует используемую в теории момента относительную фазу в.ф. состояний с различными m (для одного и того же значения l).

³⁾ Ротатором называется вращающаяся относительно центра масс (в плоскости или в пространстве) система из двух жестко связанных друг с другом частиц. Момент инерции ротатора равен $I = \mu a^2$, где μ — приведенная масса частиц, a — расстояние между ними.

3.2. Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии пространственного (сферического) ротатора с моментом инерции I . Какова кратность вырождения уровней?

В состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi = C \cos^2 \theta$, найти вероятности различных значений энергии, момента и его проекции на ось z , а также средние значения и флуктуации этих величин.

3.3. Показать, что равенство $\mathbf{L}^2 = l(l+1)$ получается с помощью элементарных формул теории вероятностей, исходя из того, что проекция момента на произвольную ось может принимать лишь значения $m = -l, -l+1, \dots, l$, причем все они равновероятны, а оси равноправны.

3.4. Дать наглядную интерпретацию:

а) коммутативности операторов проекций импульса,

б) некоммутируемости операторов проекций момента импульса,

в) коммутативности операторов проекций импульса и момента импульса на одну и ту же ось и их некоммутируемости для проекций на различные оси, исходя из кинематического смысла этих операторов, связанного с бесконечно малыми переносами и поворотами.

3.5. Найти следующие коммутаторы:

$$а) [\hat{l}_i, \mathbf{r}^2], [\hat{l}_i, \hat{\mathbf{p}}^2], [\hat{l}_i, (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})], [\hat{l}_i, (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})^2],$$

$$б) [\hat{l}_i, (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}) \hat{p}_k], [\hat{l}_i, (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}) \hat{x}_k], [\hat{l}_i, (a\hat{x}_k + b\hat{p}_k)],$$

$$в) [\hat{l}_i, \hat{x}_k \hat{x}_l], [\hat{l}_i, \hat{p}_k \hat{p}_l], [\hat{l}_i, \hat{x}_k \hat{p}_l]$$

(a, b — постоянные величины). Обратить внимание на одинаковую структуру коммутаторов для операторов, входящих в одну и ту же группу. С чем связана такая универсальность коммутационных соотношений?

3.6. Найти нормированные соответствующим образом волновые функции $\Psi_{r_0 l m}$, описывающие состояния частицы, находящейся на расстоянии r_0 от начала координат, имеющей момент l и его проекцию m на ось z .

3.7. Найти общие собственные функции операторов проекций на ось z импульса и момента импульса частицы.

3.8. Показать, что средние значения векторов $\bar{\mathbf{L}}$, $\bar{\mathbf{r}}$, $\bar{\mathbf{p}}$ в состоянии частицы с волновой функцией $\Psi = \exp(i\mathbf{p}_0\mathbf{r}/\hbar)\varphi(\mathbf{r})$, где \mathbf{p}_0 — вещественный вектор, а $\varphi(\mathbf{r})$ — вещественная функция, связаны классическим соотношением $\bar{\mathbf{L}} = [\bar{\mathbf{r}} \bar{\mathbf{p}}]$.

3.9. Найти собственные функции операторов $\hat{\mathbf{I}}^2$ и \hat{I}_z в импульсном представлении. Показать, что в состояниях с определенными значениями l , m средний импульс частицы $\bar{\mathbf{p}} = 0$.

3.10. Показать, что функции, получающиеся в результате действия операторов $\hat{I}_{\pm} = \hat{I}_x \pm i\hat{I}_y$ на собственные функции Ψ_m оператора \hat{I}_z , также являются собственными функциями \hat{I}_z , отвечающими уже собственным значениям $m \pm 1$.

Показать также, что в состоянии с волновой функцией Ψ_m

$$a) \bar{l}_x = \bar{l}_y = 0, \quad б) \bar{l}_x^2 = \bar{l}_y^2, \quad в) \overline{\hat{l}_x \hat{l}_y + \hat{l}_y \hat{l}_x} = 0.$$

3.11. В состоянии Ψ_{lm} с определенными значениями момента l и его проекции m на ось z найти средние значения \bar{l}_x^2 , \bar{l}_y^2 , а также среднее значение и флуктуацию проекции момента на ось \tilde{z} , составляющую угол α с осью z .

3.12. Доказать соотношение

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

3.13. Указать вид волновой функции $\Psi_{l, \tilde{m}=0}(\mathbf{n})$ состояния частицы с моментом l и его проекцией $\tilde{m} = 0$ на ось \tilde{z} , направление которой в пространстве определяется единичным вектором \mathbf{n}_0 . В рассматриваемом состоянии найти вероятности различных значений проекции момента на ось z .

3.14. Обозначим через $\omega_l(m_1; m_2, \alpha)$ вероятность значения m_2 проекции момента на ось \tilde{z} , составляющую угол α с осью z , в состоянии частицы с определенными значениями момента l и его проекции m_1 на ось z . Доказать равенство $\omega_l(m_1; m_2, \alpha) = \omega_l(m_2; m_1, \alpha)$ (воспользоваться результатом задачи 1.43).

3.15. Найти проекционные операторы $\hat{P}(M)$, проектирующие на состояния с заданным значением M

проекции момента на ось z (искомые операторы действуют в пространстве векторов состояний, отвечающих определенному значению L момента).

3.16. Используя коммутационные соотношения для операторов компонент момента, найти $\text{Sp } \hat{L}_i$, где \hat{L}_i — матрица i -й компоненты момента l .

3.17. Найти шпурь следующих матриц:

а) \hat{L}_i , б) $\hat{L}_i \hat{L}_k$, в) $\hat{L}_i \hat{L}_k \hat{L}_l$, г) $\hat{L}_i \hat{L}_k \hat{L}_l \hat{L}_m$, где \hat{L}_i — матрица i -й компоненты момента L .

§ 2. Момент $L = 1$

3.18. В случае момента частицы $l = 1$ найти волновую функцию $\Psi_{\tilde{m}=0}(\theta, \varphi)$ состояния с определенной проекцией момента $\tilde{m} = 0$ на ось \tilde{z} , направление которой в пространстве определяется полярным α и азимутальным β углами.

3.19. Найти волновые функции $\Psi_{l_x}(\theta, \varphi)$ и $\Psi_{l_y}(\theta, \varphi)$ состояний частицы с моментом $l = 1$ и определенным значением проекции момента на оси x и y соответственно. Воспользоваться известным видом шаровых функций $Y_{1m}(\theta, \varphi)$, см. (III.7).

3.20. Частица находится в состоянии с моментом $l = 1$ и его проекцией m ($m = 0, \pm 1$) на ось z . Найти вероятности $\omega(m', m)$ различных значений проекции момента m' на ось z' , составляющую угол α с осью z .

Задачу предлагается решить одним из следующих способов:

а) используя результат задачи 3.11;

б) путем нахождения коэффициентов разложения $c(m', m)$ заданной волновой функции в ряд по собственным функциям оператора $\hat{L}_{z'}$.

3.21. Показать, что в случае момента частицы $l = 1$ три функции $\Psi_{l_x=0}(\theta, \varphi)$, $\Psi_{l_y=0}(\theta, \varphi)$, $\Psi_{l_z=0}(\theta, \varphi)$, описывающие состояния частицы с равной нулю проекцией момента на оси x , y , z соответственно, образуют полную систему функций.

Какой смысл имеют коэффициенты разложения волновой функции произвольного состояния с $l = 1$ по этим функциям?

3.22. Указать в l_2 -представлении явный вид операторов компонент момента, а также повышающе-

го \hat{l}_+ и понижающего \hat{l}_- операторов ($\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$) для момента $l = 1$.

Найти из решения уравнения на собственные функции волновую функцию в l_z -представлении состояния частицы с $l_x = 0$.

3.23. В состоянии частицы с моментом $l = 1$ и его проекцией m на ось z найти следующие средние: $\overline{l_x^n}$, $\overline{l_y^n}$ (n — целое).

3.24. Найти явный вид оператора $\hat{R}(\varphi_0) = \exp(i\varphi_0 \hat{l})$ поворота системы координат на угол φ_0 , действующего в пространстве векторов состояний, отвечающих моменту $l = 1$. С помощью этого оператора получить из шаровой функции Y_{10} волновую функцию $\Psi_{\tilde{m}=0}(\theta, \varphi)$ состояния частицы с моментом $l = 1$ и его проекцией $\tilde{m} = 0$ на ось \tilde{z} , направление которой определяется полярным α и азимутальным β углами. Сравнить с 3.18.

3.25. В пространстве векторов состояний, отвечающих моменту $l = 1$, найти проекционные операторы $\hat{P}(m)$ для состояний с определенной проекцией момента m на ось z . Обобщить результат на случай произвольно направленной оси \tilde{z} . С помощью оператора $\hat{P}(\tilde{m})$ найти в l_z - и в координатном представлении волновую функцию $\Psi_{\tilde{m}=0}$ состояния частицы с моментом $l = 1$ и его проекцией $\tilde{m} = 0$ на ось \tilde{z} . Сравнить с 3.18 и 3.24.

§ 3. Сложение моментов

3.26. Записать оператор момента системы из двух частиц в виде суммы двух слагаемых, соответствующих моменту частиц в с. ц. и. (т. е. моменту относительного движения) и моменту поступательного движения системы как целого.

3.27. Моменты l_1 и l_2 двух слабо взаимодействующих систем складываются в результирующий момент величины L . Показать, что в таких состояниях (с определенным L) скалярные произведения $\hat{l}_1\hat{l}_2$, $\hat{l}_1\hat{L}$, $\hat{l}_2\hat{L}$ также имеют определенные значения.

3.28. Найти следующие коммутаторы:

а) $[\hat{L}_i, (\hat{l}_1\hat{l}_2)]$, $[\hat{L}_i, (\hat{r}_1\hat{p}_2)]$, $[\hat{L}_i, (\hat{r}_1\hat{r}_2)]$;

б) $[\hat{L}_i, \hat{x}_{1k}]$, $[\hat{L}_i, \hat{g}_k]$ с $\hat{g} \equiv [\hat{l}_1\hat{l}_2]$;

в) $[\hat{L}_i, \hat{x}_{1k}\hat{x}_{2l}], [\hat{L}_i, \hat{x}_{1k}\hat{p}_{2l}]$,

где \hat{I}_1, \hat{I}_2 — операторы моментов двух частиц, $\hat{L} = \hat{I}_1 + \hat{I}_2$ — оператор их суммарного момента. Обратить внимание на универсальную структуру (внутри каждой группы) коммутаторов. Сравнить с 3.5.

3.29. Имеются две слабо взаимодействующие системы 1 и 2, состояния которых характеризуются квантовыми числами (l_1, m_1) и (l_2, m_2) момента и его проекции на ось z .

Указать возможные значения полного момента L совокупной системы $(1+2)$ и вычислить средние значения \bar{L} и \bar{L}^2 в рассматриваемом состоянии. Для частного случая $m_1 = l_1, m_2 = l_2 - 1$ найти вероятности различных значений суммарного момента.

3.30. Показать, что при сложении двух одинаковых по величине моментов $(l_1 = l_2 = l)$ в результирующий момент L волновая функция $\Psi_L(m_1, m_2)$ в $l_1 z l_2 z$ -представлении имеет определенную симметрию по отношению к взаимной перестановке m_1 и m_2 .

Как зависит характер симметрии от значения L ?

3.31. Показать, что в состоянии системы из двух одинаковых по величине моментов $(l_1 = l_2)$, отвечающем определенным значениям суммарного момента L и его проекции M на ось z , вероятности значений проекций складываемых моментов $m_{1(2)} = m$ и $m_{1(2)} = M - m$ равны.

3.32. Две подсистемы, имеющие одинаковые моменты $l_1 = l_2 = 1$, находятся в состояниях с определенными значениями проекций момента m_1 и m_2 . Найти вероятности различных значений суммарного момента L в таких состояниях. При решении задачи воспользоваться результатом 3.29 для значения \bar{L}^2 и учесть характер симметрии волновой функции состояния с определенным значением L , установленный в 3.30 (отметим, что при произвольных значениях $l_{1,2}$ и $m_{1,2}$ искомая вероятность $w(L) = |C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{L, m_1 + m_2}|^2$, где $C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM}$ — коэффициенты Клебша — Гордана; см. 3.38).

3.33. Проиллюстрировать связь, установленную в задаче 1.43, и ее вероятностный смысл на примере сложения моментов l_1, l_2 двух слабо взаимодействующих подсистем в результирующий момент L .

3.34. Для системы из двух одинаковых по величине моментов $l_1 = l_2 = l$ найти в $l_{1z}l_{2z}$ -представлении волновую функцию состояния с суммарным моментом $L = 0$ (воспользоваться операторами \bar{L}_{\pm}). Указать также ее вид в координатном представлении.

3.35. Моменты двух частиц равны $l_1 = l_2 = 1$. Построить волновые функции Ψ_{LM} состояний с определенными значениями L суммарного момента и его проекции M на ось z (при решении использовать результаты задач 3.30 и 3.34).

3.36. Используя технику проекционных операторов, для системы из двух моментов $l_1 = l_2 = 1$ найти волновую функцию $\Psi_{L=0}$ состояния с суммарным моментом $L = 0$. Сравнить с 3.34.

3.37. Произвести классификацию независимых состояний системы, состоящей из трех слабозадействующих подсистем с моментами $l_1 = l_2 = 1$ и $l_3 = l$ по значениям суммарного момента L системы.

3.38. Как известно, проблема сложения моментов двух систем l_1 и l_2 в результирующий момент L решается в общем виде следующим соотношением:

$$\Psi_{LM} = \sum_{m_1 m_2} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM} \Psi_{l_1 m_1}^{(1)} \Psi_{l_2 m_2}^{(2)}, \quad M = m_1 + m_2,$$

где $C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM}$ — коэффициенты Клебша — Гордана. Используя технику повышающих (понижающих) операторов \hat{L}_{\pm} , найти коэффициенты Клебша — Гордана в случае $L = l_1 + l_2$.

3.39. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае $l_1 = l_2, L = 0$.

3.40. В случае двух слабозадействующих систем с моментами j_1 и j_2 усреднить следующие операторы:

а) $\hat{j}_1^{(2)} i$; б) $\hat{j}_1 i \hat{j}_2 k - \hat{j}_1 k \hat{j}_2 i$; в) $\hat{j}_1 i \hat{j}_2 k + \hat{j}_1 k \hat{j}_2 i$; г) $\hat{j}_1 i \hat{j}_1 k + \hat{j}_1 k \hat{j}_1 i$, по состоянию с заданным значением J момента совокупной системы, не конкретизируя зависимости волновой функции состояния от J_z .

Получить выражение для оператора магнитного момента системы $\hat{\mu} = g_1 \hat{j}_1 + g_2 \hat{j}_2$ в состоянии с определенным значением J полного момента (здесь $g_{1,2}$ — гиромагнитные множители для подсистем, связывающие их магнитные и механические моменты).

§ 4. Тензорный формализм в теории момента

3.41. Показать, что функция вида

$$\Psi_l(\mathbf{n}) = \varepsilon_{ik \dots n} n_i n_k \dots n_n,$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, а $\varepsilon_{ik \dots n}$ — симметричный по любой паре индексов тензор ⁴⁾ ранга l с равным нулю следом, $\varepsilon_{iik \dots n} = 0$, является собственной функцией оператора квадрата момента частицы, отвечающей значению момента, равному l .

Показать далее, что число независимых компонент у указанного тензора равно $2l + 1$, как и число шаровых функций $Y_{lm}(\mathbf{n})$ (тем самым будет доказано, что приведенная угловая зависимость волновой функции является наиболее общей для состояний частицы с моментом l).

В частных случаях $l = 1$ и $l = 2$ указать значения компонент соответствующего тензора, $\varepsilon_i(m)$ и $\varepsilon_{ik}(m)$, при выборе которых рассматриваемая волновая функция совпадает с шаровой функцией Y_{lm} .

3.42. Согласно предыдущей задаче наиболее общая зависимость от углов волновой функции состояния частицы с моментом $l = 1$ имеет вид $\Psi_{l=1} = \varepsilon(\mathbf{n})$, где ε — произвольный комплексный вектор. Найти:

а) какому условию должен удовлетворять вектор ε , чтобы волновая функция была нормирована на единицу;

б) средние значения компонент тензора $\overline{n_i n_k}$;

в) средние значения компонент вектора момента $\overline{\mathbf{I}}$;

г) какому условию должен удовлетворять вектор ε , чтобы для рассматриваемого состояния можно было указать такую ось $\tilde{\mathbf{z}}$ в пространстве, проекция момента на которую имела бы определенное значение, равное $\tilde{m} = 0$; $\tilde{m} = \pm 1$.

3.43. В условиях предыдущей задачи найти вероятности $w(\tilde{m})$ различных значений проекции момента \tilde{m} на ось $\tilde{\mathbf{z}}$, направление которой определяется единичным вектором \mathbf{n}_0 . Показать, что для произ-

⁴⁾ Не путать с антисимметричным тензором ε_{ikl} !

вольного состояния с моментом $l = 1$ существует такое направление в пространстве, вероятность проекции момента $\tilde{m} = 0$ на которое равна нулю.

3.44. Согласно 3.41 угловая зависимость волновой функции произвольного состояния частицы с моментом $l = 1$ имеет вид $\Psi_{l=1} = (a\mathbf{n})$, т. е. полностью определяется комплексным вектором \mathbf{a} . Поэтому при рассмотрении состояний с $l = 1$ можно перейти к представлению (назовем его векторным), в котором волновой функцией является совокупность компонент вектора \mathbf{a} , т. е. $\Psi(k) \equiv a_k$ ($k = 1, 2, 3$).

Найти явный вид операторов компонент момента в векторном представлении. Установить соответствие между векторным и l_z -представлениями.

3.45. Для системы из двух частиц, имеющих моменты $l_1 = l_2 = 1$, найти:

а) наиболее общий вид угловой зависимости волновой функции;

б) наиболее общий вид угловой зависимости волновых функций Ψ_L , описывающих состояния системы с определенными значениями L ($L = 0, 1, 2$) суммарного момента;

в) угловую зависимость волновых функций Ψ_{LM} , описывающих состояния системы с определенным значением L суммарного момента и его проекции M на ось z .

При решении использовать результат задачи 3.41.

3.46. Для системы из двух частиц, одна из которых имеет момент $l_1 = 1$, найти угловую зависимость волновых функций $\Psi_{JJ_z\Lambda}$ состояний системы, отвечающих определенным значениям ее суммарного момента $J = 0$ и 1 , его проекции J_z на ось z и проекции момента Λ на направление радиуса-вектора второй частицы (при этом ограничиться случаем $\Lambda = 0$). Каковы четности рассматриваемых состояний? Каковы возможные значения момента l_2 второй частицы в таких состояниях?

Обобщить результат на случай произвольных значений l_1, J, J_z (по-прежнему $\Lambda = 0$).

3.47. Показать, что в системе из трех частиц состояния с суммарным орбитальным моментом $L = 0$ (в с. ц. и.) имеют определенную, причем положительную четность.

ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ

Решение уравнения Шрёдингера для центрального потенциала

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right] \Psi_E(\mathbf{r}) = E \Psi_E(\mathbf{r}) \quad (\text{IV. 1})$$

с учетом взаимной коммутативности операторов \hat{H} , \hat{l}^2 , \hat{l}_z можно искать в виде $\Psi_E \equiv \Psi_{nr l m}(\mathbf{r}) = R_{nr l}(r) Y_{l m}(\mathbf{n})$, где $Y_{l m}$ — шаровая функция. При этом (IV.1) сводится к одномерному радиальному у. Ш.:

$$\left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{2m}{\hbar^2} (E_{nr l} - U(r)) \right] R_{nr l}(r) = 0. \quad (\text{IV. 2})$$

Граничное условие при $r \rightarrow 0$ имеет вид ¹⁾ $R_{nr 0}(0) = \text{const} < \infty$ для $l=0$ и $R_{nr l}(0) = 0$ для $l \neq 0$.

Для частицы в кулоновском потенциале притяжения, $U = -\alpha/r$, уровни энергии и радиальные функции для состояний дискретного спектра имеют вид $E_n = -m\alpha^2/2\hbar^2 n^2$ и

$$R_{nl} = -\frac{2}{a^{3/2} n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right), \quad (\text{IV. 3})$$

где $n = n_r + l + 1$ — главное квантовое число, $a = \hbar^2/m\alpha$ (для атома водорода a определяет радиус Бора), $L_n^k(z)$ — обобщенный полином Лагерра, выражающийся через гипергеометрическую функцию

$$L_n^k(z) = (-1)^k \frac{(n!)^2}{k!(n-k)!} F(k-n, k+1, z).$$

¹⁾ При этом имеются в виду *регулярные* потенциалы, для которых $r^2 U \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$. Для них два независимых решения на малых расстояниях имеют вид $R_1 \propto r^l$ и $R_2 \propto r^{-l-1}$. Исключение из рассмотрения возрастающего решения для $l \neq 0$ естественно и связано с его ненормируемостью. При $l=0$ для растущего решения, $R_2 \propto 1/r$, имеем $\Delta R_2 \propto \delta(r)$, так что оно не удовлетворяет уравнению (IV.1) при $r \rightarrow 0$. Такое решение, квадратично интегрируемое на малых расстояниях, используется при моделировании короткодействующего центра потенциалом нулевого радиуса, см. задачу 4.10. Для *сингулярного* потенциала притяжения возникает «падение на центр» и вопрос о выборе граничного условия при $r \rightarrow 0$ требует дополнительного исследования, см. в связи с этим 9.14.

В частности, для нескольких нижних состояний

$$\begin{aligned} R_{10} &= 2a^{-3/2}e^{-r/a} && \text{(основное, } 1s\text{-состояние),} \\ R_{20} &= (2a^3)^{-1/2}(1 - r/2a)e^{-r/2a} && \text{(} 2s\text{-состояние),} \\ R_{21} &= (24a^5)^{-1/2}re^{-r/2a} && \text{(} 2p\text{-состояние).} \end{aligned} \quad (\text{IV. 4})$$

Для решения уравнения (IV. 2) часто оказывается удобным перейти к новой функции $\chi_{nrl} = rR_{nrl}$, для которой

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right] \chi_{nrl} = E_{nrl} \chi_{nrl} \quad (\text{IV. 5})$$

и $\chi_{nrl}(0) = 0$; это уравнение по форме совпадает с обычным уравнением Шрёдингера в одномерном случае.

Часто используется также подстановка $u_{nrl} = \sqrt{r} R_{nrl}$; тогда уравнение принимает вид

$$u''_{nrl} + \frac{1}{r} u'_{nrl} - \left[\frac{l(l+1/2)^2}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (U(r) - E_{nrl}) \right] u_{nrl} = 0, \quad (\text{IV. 6})$$

а граничное условие в нуле $u_{nrl}(0) = 0$.

§ 1. Состояния дискретного спектра в центральных полях

4.1. Указать связь энергетических уровней $E_{n,r,0}$ и нормированных волновых функций $\Psi_{n,r,0}(r)$ стационарных s -состояний дискретного спектра частицы в центральном потенциале $U(r)$ с уровнями E_n и нормированными функциями $\Psi_n(x)$ в одномерном потенциале $\bar{U}(x)$ вида $\bar{U}(x) = U(x)$ при $x > 0$, $\bar{U}(x) = \infty$ при $x < 0$ (см. также задачу 2.5).

Используя установленное соответствие, найти:

а) спектр s -уровней в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме, т. е. $U(r) = 0$ при $r < a$ и $U = \infty$ при $r > a$;

б) условие существования связанных состояний частицы в потенциале: $U = -U_0$ при $r < a$ и $U = 0$ при $r > a$.

4.2. Как изменяются значения E_{nrl} энергетических уровней частицы дискретного спектра

а) при фиксированном значении l с увеличением n_r ,

б) при фиксированном значении n_r с увеличением l ?

4.3. Пусть N — номер уровня в центральном потенциале в порядке возрастания энергии (основному уровню отвечает $N = 1$). Каковы для N -го уровня

а) максимально возможное значение момента l ,

б) максимально возможная кратность вырождения уровня,

в) максимально возможная кратность вырождения уровня при условии, что он имеет определенную четность?

4.4. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции сферического осциллятора, $U = kr^2/2$, используя при решении уравнения Шрёдингера разделение переменных в декартовых координатах. Определить кратность вырождения уровней и произвести их классификацию по значениям квантовых чисел n_r , l и четности. Связать «случайное» вырождение уровней с коммутативностью операторов $\hat{T}_{ik} = \hat{p}_i \hat{p}_k / m + k \hat{x}_i \hat{x}_k$ с гамильтонианом осциллятора.

4.5. Рассмотреть стационарные состояния сферического осциллятора (см. предыдущую задачу), используя при решении уравнения Шрёдингера сферические координаты.

4.6. В основном состоянии атома водорода найти:

а) $\overline{r^n}$ для электрона, n — целое;

б) среднюю кинетическую и потенциальную энергию электрона;

в) распределение по импульсам электрона;

г) эффективный (средний) потенциал $\phi(r)$, создаваемый атомом.

4.7. Найти среднее электрическое поле $\mathcal{E}(\mathbf{r})$ и его флуктуацию (флуктуацию компонент поля) на больших расстояниях от атома водорода, находящегося в основном состоянии. Обратит внимание на характер убывания найденных величин с увеличением расстояния.

4.8. Найти s -уровни в потенциалах:

а) $U = -\alpha\delta(r - a)$; б) $U = -U_0 e^{-r/a}$;

в) $U = -U_0(e^{r/a} - 1)$.

4.9. Найти уровни с произвольным моментом l в потенциалах:

а) $U = -\alpha\delta(r - a)$; б) $U = 0$ при $r < a$ и $U = \infty$ при $r > a$.

4.10. Потенциал нулевого радиуса (трехмерный аналог одномерного δ -потенциала, см. 2.7) задается наложением на волновую функцию граничного условия вида ²⁾

$$(r\Psi(r))'/(r\Psi(r)) \rightarrow -\alpha_0 \quad \text{при } r \rightarrow 0,$$

т. е.

$$\Psi \propto \left(-\frac{1}{\alpha_0 r} + 1 + \dots \right).$$

Обсудить вопрос о возможности существования (в зависимости от знака α_0) в таком потенциале связанных состояний частицы. Найти волновую функцию связанного состояния в импульсном представлении. Каковы средние значения \bar{T} , \bar{U} ?

4.11. Найти энергетический спектр частицы, находящейся в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме радиуса a и испытывающей также действие в точке $r=0$ потенциала нулевого радиуса (п. н. р.). Сравнить со спектрами в яме и в п. н. р. в отдельности. Обратит внимание на возможность существенной перестройки спектра «ямных» уровней под влиянием п. н. р.

4.12. Обсудить вопрос о связанных состояниях частицы в случае *сепарабельного* потенциала, представляющего интегральный оператор с ядром (сравнить с 2.19): $U(r, r') = -\lambda f(r)f^*(r')$, причем $f(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Рассмотреть конкретный случай $U = -(\lambda/rr') \exp(-\gamma(r+r'))$ (потенциал Ямагучи).

4.13. Рассмотреть связанные s -состояния частицы в δ -потенциале $U = -\alpha\delta(r-a)$, исходя из решения уравнения Шрёдингера в импульсном представлении.

4.14. Найти решение уравнения Шрёдингера предыдущей задачи с граничным условием $\Phi(\rho) = 0$ для $\rho \leq \rho_0$ ($\rho_0 > 0$).

Показать, что в такой постановке задачи в яме произвольной глубины имеется связанное состояние,

²⁾ Такой «потенциал», оказывающий действие лишь на частицу с $l=0$, моделирует потенциальную яму достаточно произвольного вида $U(r)$ конечного радиуса r_S в случае, если в ней имеется мелкий реальный (или виртуальный) уровень с энергией ϵ_0 такой, что $\epsilon_0 \ll \hbar^2/mr_S^2$. При этом свойства состояний частицы с моментом $l=0$ и энергией $E \ll \hbar^2/mr_S^2$ слабо зависят от конкретного вида $U(r)$. Применения потенциалов нулевого радиуса в задачах атомной и ядерной физики рассмотрены в главах 11 и 13, см. также монографии [19, 20].

в котором частица локализована в ограниченной области пространства, и найти энергию связи частицы в случае мелкой ямы. Образование связанного состояния в рассматриваемой постановке задачи при наличии сколь угодно слабого притяжения составляет содержание так называемого феномена Купера — явления, лежащего в основе микроскопического механизма сверхпроводимости.

4.15. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции дискретного спектра в одномерном потенциале $U = -\alpha/x$ при $x > 0$ и $U = \infty$ при $x < 0$ из решения уравнения Шрёдингера в импульсном представлении. Используя полученный результат, найти нормированные волновые функции s -состояний частицы в импульсном представлении для кулоновского потенциала $U(r) = -\alpha/r$.

4.16. Найти поведение при $p \rightarrow 0$ волновой функции $\Phi_{nrlm}(\mathbf{p})$ стационарного состояния дискретного спектра с моментом l частицы в импульсном представлении.

4.17. Показать, что асимптотика волновой функции стационарного s -состояния частицы в импульсном представлении при $p \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\Phi_{n_r00}(p) \approx -2(2\pi\hbar)^{3/2} \Psi_{n_r00}(0) m p^{-2} \tilde{U}(p),$$

где $\Psi_{n_r00}(r)$ — волновая функция состояния в координатном представлении,

$$\tilde{U}(p) = (2\pi\hbar)^{-3} \int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} U(r) dV$$

— фурье-компонента потенциала. Предполагается, что $\tilde{U}(p)$ при $p \rightarrow \infty$ убывает степенным образом: $\tilde{U}(p) \propto p^{-n}$ с $n > 1$ и не содержит быстро осциллирующего множителя вида $\sin(\alpha p^k)$ с $k \geq 1$.

4.18. Показать, что обобщение результата предыдущей задачи на случай состояния с произвольным значением момента l имеет вид

$$\Phi_{n_rlm}(\mathbf{p}) \underset{p \rightarrow \infty}{\approx} -2(2\pi\hbar)^{3/2} (2i)^l m \hbar^l \tilde{R}_{nrl}(0) \times \\ \times Y_{lm}\left(\frac{\mathbf{p}}{p}\right) p^{l-2} \frac{\partial^l}{\partial (p^2)^l} \tilde{U}(p),$$

где $\tilde{R}_{nrl}(r)$ связано с волновой функцией в координатном представлении соотношением $\Psi_{nrlm}(\mathbf{r}) = = r^l \tilde{R}_{nrl}(r) Y_{lm}(\mathbf{r}/r)$.

4.19. Частица находится в потенциале, имеющем при $r \rightarrow 0$ вид $U \approx \alpha/r^s$ с $s < 2$. При этом радиальная волновая функция состояния с моментом l имеет вид $R_{nrl} \approx C_{nrl} r^l$. Найти поправку к этому выражению при значениях $0 < s < 2$.

4.20. Найти функцию Грина $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ свободной частицы для значений $E < 0$, убывающую при $r \rightarrow \infty$. С помощью функции Грина записать уравнение Шрёдингера для состояний дискретного спектра в потенциале $U(r)$, обращающемся в нуль при $r \rightarrow \infty$, в виде интегрального уравнения.

4.21. Как известно, у частицы в потенциале притяжения $U(r) \leq 0$ ($U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$) не всегда имеются связанные состояния. Показать, что необходимым условием существования таких состояний является выполнение неравенства

$$\int_0^{\infty} r |U(r)| dr \geq \hbar^2/2m.$$

Сравнить это условие с точным условием существования состояний дискретного спектра в потенциальных полях: прямоугольная яма (см. 4.1), δ -потенциал и экспоненциальная яма (см. 4.8), см. также 4.32.

4.22. Показать, что выполнение условия

$$\frac{m}{2\hbar^2} \left\{ \int_0^{\infty} U(r) [1 - \exp(-2\sqrt{2m\varepsilon_0/\hbar^2} r)] dr \right\}^2 \geq \varepsilon_0$$

является необходимым для существования в центральном потенциале $U(r) \leq 0$ ($U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$) связанного состояния частицы с энергией связи ε_0 (при $\varepsilon_0 \rightarrow 0$ это условие соответствует результату предыдущей задачи).

4.23. Найти функцию Грина $G_{l,E}(r, r')$ радиального уравнения Шрёдингера (IV.6) для свободной частицы с $E = -\hbar^2 \kappa^2/2m < 0$ на отрезке $[a, b]$ (при

этом $0 \leq a < b \leq \infty$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} - \kappa^2 \right] G_{l,E}(r, r') = \delta(r - r'),$$

удовлетворяющую граничным условиям $G_{l,E}(a, r') = G_{l,E}(b, r') = 0$.

4.24. Показать, что выполнение условия

$$\int_0^{\infty} r |U(r)| dr \geq (2l+1) n_l \hbar^2 / 2m$$

является необходимым для существования в потенциале притяжения $U(r) \leq 0$ ($U \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$) n_l уровней с моментом l частицы.

§ 2. Состояния с малой энергией связи.

Частица в совместном поле короткодействующего и дальнодействующего потенциалов

4.25. Обобщить результат задачи 2.13 на случай s -состояний частицы в центральном поле. Найти условия существования и появления новых дискретных s -уровней в потенциалах:

- а) $U = -\alpha/r^4$ при $r > a$ и $U = \infty$ при $r < a$, рис. 17;
 б) $U = -\alpha/(r+a)^4$, $a > 0$;
 в) $U = -U_0 a^4 / (r^2 + a^2)^2$;

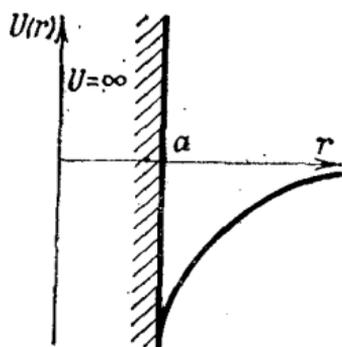


Рис. 17

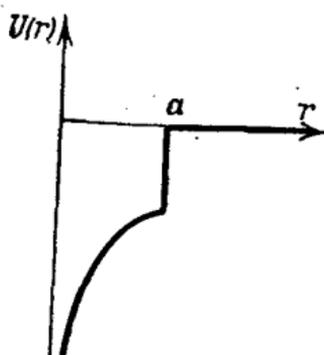


Рис. 18

г) $U = -\alpha/r^s$ при $r > a$ и $U = \infty$ при $r < a$; $s > 2$, рис. 17;

д) $U = -\alpha/r^s$ при $r < a$ и $U = 0$ при $r > a$; $0 < s < 2$, рис. 18.

4.26. Обсудить вопрос об условиях существования и появления новых связанных состояний частицы

с отличными от нуля значениями момента при углублении потенциальной ямы на основе уравнения Шрёдингера для $E = 0$. Каково качественное отличие волновой функции в момент возникновения связанного состояния с $l \neq 0$ по сравнению со случаем $l = 0$? Рассмотреть конкретные потенциалы а) $U = -\alpha\delta(r-a)$; б) $U = -\alpha/r^4$ при $r > a$ и $U = \infty$ при $r < a$, рис. 17.

4.27. Параметры центрального потенциала $U_0(r)$ таковы³⁾, что в нем имеется состояние дискретного спектра с моментом $l = 0$ и $E = 0$. Волновая функция $\Psi_0 = \chi_0(r)/\sqrt{4\pi r}$ этого состояния (т. е. в момент возникновения уровня) считается известной и нормированной, для определенности, условием $\chi_0(r) \rightarrow 1$ при $r \rightarrow \infty$. Показать, что смещение этого уровня δE_0 под влиянием малого возмущения $\delta U \leq 0$ описывается выражением

$$\delta E_0 \approx -\frac{2m}{\hbar^2} \left[\int_0^\infty \delta U(r) \chi_0^2(r) dr \right]^2.$$

Применить полученный результат к потенциалу $U = -\alpha\delta(r-a)$ и сравнить с точным решением, см. 4.8, а.

4.28. Показать, что обобщение результата предыдущей задачи на случай $l \neq 0$ имеет вид

$$\delta E_l = \int_0^\infty \delta U(r) (\chi_l^{(0)}(r))^2 dr,$$

где $\chi_l^{(0)}$ — волновая функция в момент возникновения уровня ($\Psi^{(0)} = \chi_l^{(0)} Y_{lm}/r$) — нормирована уже обычным условием $\int_0^\infty (\chi_l^{(0)})^2 dr = 1$.

Обратить внимание на различные законы углубления уровня $\delta E_l \propto \delta U$ и $\delta E_0 \propto -(\delta U)^2$ под влиянием возмущения в случаях $l \neq 0$ и $l = 0$ соответственно.

³⁾ При решении считать для простоты, что $U \equiv 0$ при $r > a$, a — радиус потенциала. Утверждение задачи сохраняется и для потенциалов, убывающих при $r \rightarrow \infty$ быстрее, чем $\propto 1/r^2$. В связи с задачами 4.27 и 4.28 см. также 13.49.

Применить полученный результат к δ -потенциалу и сравнить с точным решением, см. 4.9, а.

4.29. Найти ⁴⁾ сдвиги энергетических уровней частицы в центральном поле $U(r)$ под влиянием потенциала нулевого радиуса (п. н. р., см. 4.10), считая их малыми по сравнению с расстоянием между невозмущенными уровнями. Спектр и собственные функции оператора Гамильтона для потенциала $U(r)$ считать известными. Указать условие применимости полученного результата. В качестве иллюстрации рассмотреть приложение к задаче 4.11.

4.30. Показать, что обобщение результата предыдущей задачи на случай, когда состояние $\Psi_n^{(0)}(r)$ является слабосвязанным, имеет вид

$$E_n \approx - \left[\sqrt{-E_n^{(0)}} - \frac{1}{\alpha_0} \sqrt{\hbar^2/2m} (\tilde{R}_n^{(0)}(0))^2 \right]^2,$$

здесь $\tilde{R}_n^{(0)}(r)$ — радиальная волновая функция в момент появления s -уровня с $E = 0$, нормированная условием $r\tilde{R}_n^{(0)}(r) \rightarrow 1$ при $r \rightarrow \infty$.

4.31. Частица находится в поле $U(\mathbf{r})$ (причем $rU \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$) и испытывает также действие потенциала нулевого радиуса, локализованного в точке $\mathbf{r} = 0$, см. 4.10. Считая известной функцию Грина частицы $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ в потенциале $U(\mathbf{r})$, показать, что спектр связанных состояний в рассматриваемой системе может быть определен из уравнения ⁵⁾

$$\left[\frac{\partial}{\partial r} (rG_0(r, 0; E)) \right]_{r=0} = - \frac{m\alpha_0}{2\pi\hbar^2}.$$

Получить отсюда для сдвига уровня результат теории возмущений по длине рассеяния (см. задачу 4.29, а также 11.4):

$$\Delta E_n \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m} |\Psi_n^{(0)}(0)|^2 a_0,$$

здесь $a_0 \equiv 1/\alpha_0$ — длина рассеяния в п. н. р., $\Psi_n^{(0)}(\mathbf{r})$ — волновая функция невозмущенного уровня, существующего в потенциале $U(\mathbf{r})$, а ΔE_n — его сдвиг под влиянием п. н. р.

⁴⁾ По затронутым в задачах 4.29—31 вопросам см. также 11.4 и 9.3.

⁵⁾ Многочисленные приложения этой формулы рассмотрены в [20].

4.32. Для монотонного потенциала притяжения: $U'(r) \geq 0$ и $U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, показать, что выполнение неравенства

$$\frac{2}{\pi\hbar} \int_0^{\infty} \sqrt{-2mU(r)} dr \geq 1$$

является необходимым условием существования связанного состояния; сравнить с 4.21.

Указание. Рассмотреть потенциал $\tilde{U}(r)$, для которого волновая функция в момент возникновения связанного состояния имеет вид

$$\chi_0 = \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_r^{\infty} p_0(r) dr\right), \quad \text{где } p_0(r) = \sqrt{-2m\tilde{U}(r)},$$

и сравнить его с $U(r)$.

§ 3. Системы с аксиальной симметрией

4.33. Найти энергетические уровни дискретного спектра частицы в двумерной потенциальной яме вида

а) $U(\rho) = -\alpha\delta(\rho - a)$;

б) $U = -U_0$ при $\rho < a$ и $U = 0$ при $\rho > a$,

отвечающие значению проекции момента $m = 0$. Специально обсудить случай мелкой ямы; сравнить с одномерным движением.

4.34. Найти энергетический спектр связанных состояний частицы с произвольным значением проекции момента m в двумерных потенциальных полях:

а) $U(\rho) = -\alpha/\rho$;

б) $U = 0$ при $\rho < a$ и $U = \infty$ при $\rho > a$.

Указать кратность вырождения уровней.

4.35. В двумерном случае найти функцию Грина свободной частицы при энергии $E < 0$, убывающую при $\rho \rightarrow \infty$.

4.36. То же, что и в предыдущей задаче, но для $E > 0$. Рассмотреть функции Грина $G_E^{(\pm)}$, имеющие асимптотики при $\rho \rightarrow \infty$ вида расходящейся и сходящейся волн.

4.37. Найти функцию Грина $G_E(\varphi, \varphi')$ плоского ротатора (см. 3.1). Рассматривая ее как аналитическую функцию комплексной переменной E , показать, что она имеет особые точки — полюсы, и установить связь между положениями этих полюсов в плоскости E и энергетическими уровнями ротатора, сравнить с 2.26.

4.38. Найти функцию Грина $G_E(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ сферического ротатора, \mathbf{n} — единичный вектор вдоль оси ротатора (см. 3.2). Задачу предлагается решить двумя способами:

1) непосредственно решая уравнение для функции Грина,

2) используя общий алгоритм построения функции Грина; см. [15, с. 136].

Г л а в а 5

СПИН

Волновая функция частицы со спином s имеет $(2s + 1)$ компоненту и в s_z -представлении изображается в виде столбца

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{r}, s) \\ \psi(\mathbf{r}, s - 1) \\ \vdots \\ \psi(\mathbf{r}, -s) \end{pmatrix}, \quad (\text{V. 1})$$

где $\psi(\mathbf{r}, \sigma)$ является амплитудой состояния с проекцией спина на ось z , равной σ , причем $\sigma = s, s - 1, \dots, -s$. В этом представлении операторы компонент вектора спина — механического момента по своей физической природе — изображаются матрицами $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$, элементы которых определяются общими формулами (III.9) с $l = s, m = \sigma$; матрица \hat{s}_z диагональна и $(\hat{s}_z)_{\sigma\sigma'} = \sigma\delta_{\sigma\sigma'}$.

Для спина $s = 1/2$ эти операторы $\hat{\mathbf{s}} = 1/2\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ выражаются через матрицы Паули:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{V. 2})$$

Матрицы Паули обладают следующим свойством¹⁾:

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k = \delta_{ik} + i \epsilon_{ikl} \hat{\sigma}_l \quad (\text{V. 3})$$

(здесь $i, k = 1, 2, 3$; при этом $\hat{\sigma}_1 \equiv \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_2 \equiv \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_3 \equiv \hat{\sigma}_z$).

В случае $s = 1/2$ для компонент спиновой функции часто используются обозначения $\psi_1 \equiv \psi(\sigma = +1/2)$ и $\psi_2 \equiv \psi(\sigma = -1/2)$, так что $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$, а скалярное произведение в спиновом пространстве записывается в виде $\langle \Phi | \Psi \rangle \equiv \Phi^* \Psi \equiv \Phi_1^* \psi_1 + \Phi_2^* \psi_2$.

Отметим характерное для $s = 1/2$ свойство произвольного спинового состояния: возможность всегда указать такое направление, на которое проекция спина имеет определенное (равное $\pm 1/2$) значение. Если записать нормированную на 1 спиновую функцию наиболее общего состояния в виде

$$\Psi = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad (\text{V. 4})$$

то θ и φ определяют полярный и азимутальный углы такой оси \mathbf{n} , для которой $s_n = +1/2$, см. 5.3.

Часто приходится иметь дело со спиновым состоянием, описываемым матрицей плотности $\hat{\rho}$. Элементы $\rho_{\sigma\sigma'}$ такой матрицы сопоставляются билинейной комбинации $\psi(\sigma)\psi^*(\sigma')$ из спиновых волновых функций и могут рассматриваться как результат некоторого усреднения ее²⁾:

$$\rho_{\sigma\sigma'} = \overline{\psi(\sigma, \lambda)\psi^*(\sigma', \lambda)} \quad (\text{V. 5})$$

(здесь λ — параметр усреднения). При этом среднее значение оператора (матрицы) \hat{f} в спиновом про-

¹⁾ В частности: $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1, \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = i \hat{\sigma}_z$ и т. д. Из (V. 3) следует антикоммутативность разных матриц Паули: $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i = 0$ для $i \neq k$.

²⁾ Матрица плотности нормирована условием $\text{Sp } \hat{\rho} = 1$. Ее диагональные элементы $\rho_{\sigma\sigma}$ определяют вероятности соответствующих значений σ проекции спина на ось z . В случае $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ матрица плотности имеет вид $\rho_{\sigma\sigma'} = \psi(\sigma)\psi^*(\sigma')$ и характеризует чистое состояние, описываемое уже волновой функцией $\psi(\sigma)$.

пространстве описывается выражением $\bar{f} = \text{Sp}(\hat{f}\hat{\rho}) = \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{f})$.

Для спина $s = 1/2$ матрица плотности может быть записана в виде

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{P}\hat{\sigma}), \quad (\text{V. 6})$$

где $\mathbf{P} = 2\bar{\mathbf{s}}$ — так называемый *вектор поляризации*. Случай $\mathbf{P} = 0$ соответствует полностью неполяризованному состоянию, а при $|\mathbf{P}| = 1$, наоборот, состояние является *чистым* и описывается спиновой функцией (V. 4) с выбором соответствующей оси вдоль вектора \mathbf{P} .

§ 1. Спин $s = 1/2$

5.1. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти собственные значения и собственные функции операторов \hat{s}_x , \hat{s}_y и \hat{s}_z соответственно.

5.2. Указать вид оператора проекции спина \hat{s}_n на произвольное направление, задаваемое единичным вектором \mathbf{n} . В состояниях с определенным значением проекции спина на ось z найти \bar{s}_n . Каковы в этих состояниях вероятности значений проекции спина $\pm 1/2$ на направление \mathbf{n} ?

5.3. В случае спина $s = 1/2$ нормированная волновая функция наиболее общего спинового состояния имеет вид $\Psi = \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ e^{i\beta} \sin \alpha \end{pmatrix}$, где $0 \leq \alpha \leq \pi/2$, $0 \leq \beta < 2\pi$. Найти полярный и азимутальный углы такой оси \mathbf{n} в пространстве, на которую проекция спина имеет определенное значение, равное $+1/2$ (возможность указать такую ось для произвольного состояния — специфика спина $s = 1/2$; сравнить с результатом 3.42 для момента $L = 1$).

Используя полученный результат, решить задачу 5.1.

5.4. Показать, что коэффициенты в разложении произвольной квадратной матрицы 2-го ранга \hat{A} по полной системе матриц $\hat{1}$, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$

$$\hat{A} = a_0\hat{1} + a_x\hat{\sigma}_x + a_y\hat{\sigma}_y + a_z\hat{\sigma}_z \equiv a_0 + \mathbf{a}\hat{\sigma}$$

равны $2a_0 = \text{Sp} \hat{A}$, $2\mathbf{a} = \text{Sp}(\hat{\sigma}\hat{A})$.

5.5. Упростить выражение $(\mathbf{a}\hat{\sigma})^n$, где \mathbf{a} — вещественный числовой вектор, n — целое число, $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули.

5.6. Найти:

1) собственные значения и собственные функции оператора $\hat{f} = a + \mathbf{b}\hat{\sigma}$,

2) явное выражение для оператора вида $\hat{F} = F(a + \mathbf{b}\hat{\sigma})$; здесь a и \mathbf{b} — вещественные скалярный и векторный параметры, $F(z)$ — достаточно произвольная функция переменной z .

Рассмотреть в качестве иллюстрации оператор $\hat{R}(\varphi_0) = \exp(i\varphi_0\hat{\sigma}/2)$, описывающий преобразование спиновой функции, $\Psi' = \hat{R}(\varphi_0)\Psi$, при повороте системы координат на угол φ_0 , и с его помощью найти собственные функции $\Psi_{s_{\mathbf{n}} = \pm 1/2}$ оператора проекции спина на направление вектора \mathbf{n} (сравнить с 5.3).

5.7. Используя закон преобразования спиновых функций $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ при вращении системы координат $\Psi' = \hat{R}(\varphi_0)\Psi$ (см. предыдущую задачу), показать, что при этом величины вида

$$S = \Phi^*\Psi = \varphi_1^*\psi_1 + \varphi_2^*\psi_2$$

не изменяются, т. е. являются скалярами, а вида

$$\mathbf{V} = \Phi^*\hat{\sigma}\Psi \quad \left(\text{или } V_i = \sum_{\alpha, \beta} \varphi_\alpha^* (\hat{\sigma}_i)_{\alpha\beta} \psi_\beta \right)$$

преобразуются как вектор.

5.8. Рассмотреть матричный элемент вида

$$\langle \Psi^{(2)} | \hat{A} | \Phi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \hat{B} | \Psi^{(1)} \rangle \equiv \psi_\alpha^{(2)*} A_{\alpha\beta} \varphi_\beta^{(1)} \varphi_\gamma^{(2)*} B_{\gamma\delta} \psi_\delta^{(1)},$$

где \hat{A} , \hat{B} — некоторые матрицы 2×2 , а $\Psi^{(1,2)}$, $\Phi^{(1,2)}$ — спиновые функции. Показать возможность записи его в форме

$$\sum_{i, k=0}^3 C_{ik} \langle \Psi^{(2)} | \hat{\sigma}_i | \Psi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \hat{\sigma}_k | \Phi^{(1)} \rangle$$

с «переставленными» спиновыми функциями; здесь для единообразия записи положено $\hat{1} \equiv \hat{\sigma}_0$. Записать таким образом скалярные матричные элементы

$$\langle \Psi^{(2)} | \Phi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \Psi^{(1)} \rangle \text{ и } \langle \Psi^{(2)} | \hat{\sigma} | \Phi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \hat{\sigma} | \Psi^{(1)} \rangle.$$

5.9. Найти проекционные операторы $\hat{P}_{s_z = \pm 1/2}$ для состояний с определенным значением проекции спина на ось z . Какой вид имеет их обобщение $\hat{P}_{s_n = \pm 1/2}$ на случай определенного значения проекции спина на ось, направление которой задается единичным вектором \mathbf{n} ? С помощью этих операторов найти спиновые функции $\Psi_{s_n = \pm 1/2}$ и сравнить с 5.3.

5.10. Для системы из двух спинов с $s = 1/2$ найти собственные функции Ψ_{SS_z} операторов квадрата суммарного спина и его проекции на ось z . Обратить внимание на характер симметрии этих функций по отношению к взаимной перестановке спиновых переменных обеих частиц в зависимости от значения S .

5.11. Система из двух спинов с $s = 1/2$ находится в состоянии, описываемом спиновой функцией вида $\Psi_{\alpha\beta} = \varphi_\alpha \chi_\beta$ (мультипликативный вид $\Psi_{\alpha\beta}$ указывает на отсутствие корреляции между спиновыми состояниями частиц).

Каковы вероятности различных значений S суммарного спина в этом состоянии? Чему равно значение $\overline{S^2}$? Рассмотреть, в частности, случай, когда $\varphi_\alpha = \chi_\alpha$.

5.12. Для системы из двух частиц со спинами $s = 1/2$ показать, что

1) оператор $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$ в состояниях, отвечающих определенному значению суммарного спина, также имеет определенное значение,

2) оператор $(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)^2$ может быть представлен в виде, содержащем матрицы Паули $\hat{\sigma}_{1,2}$ в степени не выше первой.

5.13. В условиях предыдущей задачи найти оператор спинового обмена \hat{C} , действие которого на спиновую функцию $\Psi_{\alpha\beta}$ состоит в следующем: $\hat{C}\Psi_{\alpha\beta} = \Psi_{\beta\alpha}$, т. е. он переставляет спиновые переменные обеих частиц (задача состоит в том, чтобы выразить \hat{C} через матрицы Паули).

5.14. Для системы из двух частиц со спином $s = 1/2$ найти собственные функции и собственные значения операторов:

а) $\hat{V}_1 = F(a + b\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)$, $F(x)$ — некоторая функция x ;

б) $\hat{V}_2 = a(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}) + b\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$;

$$в) \hat{V}_3 = a\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z} + b\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2;$$

$$г) \hat{V}_4 = a_1\hat{\sigma}_{1z} + a_2\hat{\sigma}_{2z} + b\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$$

(параметры a , b вещественны, так что операторы \hat{V} эрмитовы).

5.15. Спины N частиц, равные s каждый, складываются в результирующий спин $S = Ns$. Каков при этом суммарный спин любых 2, 3, ..., n частиц? Имеет ли спиновая функция определенную симметрию по отношению к перестановке спиновых переменных любых двух частиц?

5.16. Спиновая функция системы из N спинов $s = 1/2$ имеет вид

$$\Psi = \binom{1}{0}_1 \binom{1}{0}_2 \cdots \binom{1}{0}_n \binom{0}{1}_{n+1} \cdots \binom{0}{1}_N.$$

Найти $\overline{s^2}$. В частных случаях $n = 1$ и $n = N - 1$ найти также вероятности возможных значений S суммарного спина.

5.17. Состояние частицы со спином $s = 1/2$ характеризуется определенными значениями квантовых чисел l , m , s_z . Найти вероятности возможных значений j полного момента $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$; воспользоваться результатом 3.29.

5.18. Моменты двух слабо взаимодействующих подсистем, равные 1 и $1/2$, складываются в результирующий момент J . В состояниях совокупной системы, характеризующихся определенными значениями J и J_z , найти вероятности значений проекций складываемых моментов на ось z и их средние значения. При решении задачи воспользоваться операторами \hat{J}_{\pm} , не прибегая к коэффициентам Клебша — Гордана.

5.19. В системе из трех частиц со спином $s = 1/2$ имеется восемь независимых спиновых состояний. Произвести их классификацию по значениям суммарного спина системы. Найти полную систему спиновых функций ss_z , описывающих состояния с определенными значениями S , S_z суммарного спина. Обратить внимание на характер симметрии этих функций по отношению к перестановке спиновых переменных частиц и сравнить со случаем системы из двух частиц.

§ 2. Спин-орбитальные состояния частицы со спином $s = 1/2$. Высшие спины

5.20. Состояния частицы с определенным значением λ проекции спина на направление импульса называют *спиральными*³⁾. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти волновые функции $\Psi_{p_0, \lambda}$ состояний с определенными импульсом p_0 и спиральностью $\lambda = \pm 1/2$.

5.21. Для частицы со спином $s = 1/2$ показать, что наиболее общая спин-угловая зависимость волновой функции $p_{1/2}$ -состояния (т. е. состояния с $l = 1$ и полным моментом $j = 1/2$) имеет вид

$$\Psi = (\hat{\sigma}\mathbf{n})\chi, \quad \text{или} \quad \Psi_\alpha = \hat{\sigma}_{\alpha\beta}\mathbf{n}\chi_\beta,$$

где $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ — произвольный спинор, не зависящий от направления вектора \mathbf{n} ($\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ или $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$ в зависимости от используемого представления).

Нормировать на единицу эту волновую функцию.

Каково распределение (усредненное по спину) по направлениям импульса частицы в указанном состоянии?

Вычислив среднее значение \bar{j} , выяснить, как этот вектор зависит от конкретного выбора спинора χ .

Найти вид функций, описывающих $p_{1/2}$ -состояния с определенным значением $j_z = \pm 1/2$.

5.22. Провести анализ состояний частицы со спином $s = 1/2$, спин-угловая зависимость волновых функций которых имеет вид $\Psi_\pm = (1 \pm \hat{\sigma}\mathbf{n})\chi$ (спинор χ не зависит от \mathbf{n}), по значениям следующих квантовых чисел: j, l, I (четность), а также λ — с. з. оператора $\hat{\lambda} = \hat{\sigma}\mathbf{n}/2$ — проекции спина на направление вектора \mathbf{n} (при этом если $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$, т. е. используется импульсное представление, то λ является спиральностью).

Как функции Ψ_\pm преобразуются при инверсии координат?

5.23. Для частицы со спином $s = 1/2$ показать, что наиболее общая спин-угловая зависимость волновой функции состояния $p_{3/2}$ имеет вид $\Psi = \{2(\mathbf{c}\mathbf{n}) +$

³⁾ Отметим, что так как вектор импульса — *полярный*, а спина — *аксиальный*, то спиральность является псевдоскалярной величиной и при инверсии координат изменяет знак.

$+i[\mathbf{cn}]\hat{\sigma}\} \chi$, где вектор \mathbf{c} и спинор $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ от вектора $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ не зависят.

При каком конкретном выборе \mathbf{c} и χ указанная функция описывает $p_{3/2}$ -состояние с определенным значением $j_z = \pm 1/2, \pm 3/2$ проекции полного момента на ось z ?

5.24. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти спин-угловые волновые функции $\Psi_{j l j_z}$ состояний с определенными значениями l, j_z и $j = l \pm 1/2$ (l, j — орбитальный и полный моменты).

Задачу предлагается решить следующими двумя способами, не прибегая к коэффициентам Клебша — Гордана:

- 1) используя проекционные операторы \hat{P}_j ,
- 2) используя повышающие (понижающие) операторы \hat{j}_{\pm} .

5.25. Показать, что функции $\Psi_{j l j_z}$, рассмотренные в предыдущей задаче, связаны соотношением

$$\Psi_{j l_1 j_z} = (\hat{\sigma} \mathbf{n}) \Psi_{j l_2 j_z}, \quad l_{1,2} = j \pm 1/2 \quad (\mathbf{n} = \mathbf{r}/r \text{ или } \mathbf{p}/p).$$

Найти спин-угловую зависимость волновых функций $\Psi_{j l j_z \lambda}$ (в импульсном представлении) состояний частицы с определенными значениями j, j_z и спиральности λ .

5.26. Частицу со спином $s = 1$ можно описывать как симметричным спинором⁴⁾ второго ранга $\psi^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ (спинорное представление), так и векторной функцией $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ (векторное представление). Указать:

- 1) вид оператора спина в этих представлениях,
- 2) связь этих волновых функций с волновой функцией $\psi(\mathbf{r}, \sigma)$ в s_z -представлении,
- 3) явный вид рассматриваемых волновых функций для состояния частицы с орбитальным моментом $l = 1$ и полным $j = 0$.

⁴⁾ Для решения задач 5.26 и 5.27 надо знать основы спинорной алгебры и связь спиноров с тензорами, см. § 56, 57 в [1]. При этом следует различать ко- и контравариантные спинорные компоненты. Соответственно обычные матрицы Паули (V. 2) теперь надо писать не в виде $(\sigma_i)_{\alpha\beta}$, а как $\sigma_{i,\beta}^{\alpha}$; здесь i является векторным, а α и β контра- и ковариантными спинорными индексами. В 5.26 и 5.27 векторные индексы изображаются латинскими буквами, спинорные — греческими.

5.27. Частицу со спином $s = 3/2$ можно описывать как симметричным спинором третьего ранга $\psi^{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r})$, так и спин-векторной функцией $V_k^\alpha(\mathbf{r})$, удовлетворяющей дополнительному условию $(\hat{\sigma}_k)_\beta^\alpha V_k^\beta = 0$. Указать вид оператора спина и связь волновых функций в этих представлениях друг с другом и с волновой функцией $\psi(\mathbf{r}, \sigma)$ в s_z -представлении.

Указать вид волновых функций состояний частицы с $l = 1$ и полным моментом $j = 1/2$.

§ 3. Спиновая (поляризационная) матрица плотности. Угловые распределения и корреляции в распадах

5.28. Система из двух частиц с $s = 1/2$ находится в состоянии с определенными значениями S и S_z (S — суммарный спин). Найти спиновые матрицы плотности каждой из частиц в этих состояниях.

5.29. Частица со спином $s = 1/2$ находится в состоянии с определенными значениями j , l и j_z . Найти спиновую матрицу плотности, характеризующую спиновое состояние частицы безотносительно к ее положению в пространстве.

5.30. Указать ограничения на квантовые числа ⁵⁾ — спин J и внутреннюю четность P — нейтральной частицы A^0 , следующие из факта существования распадов такой частицы $A^0 \rightarrow \pi^+\pi^-$, идущих с сохранением четности; квантовые числа пиона $J_{\pi^\pm}^P = 0^-$.

Найти угловое распределение пионов в системе покоя частицы A^0 , если она находится в состоянии с определенным значением J_z , см. также 5.32.

5.31. Показать, что существование у K -мезона, имеющего спин $J_K = 0$, каналов распада как на два пиона $K \rightarrow 2\pi$, так и на три $K \rightarrow 3\pi$ (для пиона $J_\pi^P = 0^-$), свидетельствует о несохранении четности в его распадах (до открытия несохранения четности считалось, что эти каналы распада соответствуют двум различным частицам θ и τ ; и именно разрешение $\tau - \theta$ -проблемы стимулировало эксперименты, в которых непосредственно было установлено несохранение четности в *слабых взаимодействиях*).

⁵⁾ При применении закона сохранения четности к распадам, когда изменяется вид частиц, необходимо учитывать их *внутренние четности*. О распаде $A^0 \rightarrow 2\pi^0$ см. 10.5.

5.32. Покоящаяся частица X со спином J распадается на две бесспиновые частицы (например, на два пиона). Найти угловое распределение продуктов распада в случае, если

а) распадающаяся частица имеет определенное значение J_z ,

б) находится в состоянии, описываемом спиновой матрицей плотности $\rho_{mm'}$, где m — проекция спина на ось z .

В качестве иллюстрации рассмотреть угловое распределение пионов в распаде *векторной* частицы $V \rightarrow 2\pi$ ($J_V^P = 1^-$).

5.33. Найти угловое распределение продуктов распада $B \rightarrow \pi N$ нестабильной частицы B со спином $J_B = 1/2$, если

а) в распаде сохраняется четность, и четность частицы B отрицательная;

б) в распаде сохраняется четность, и четность частицы B положительная;

в) распад происходит с несохранением четности. Предполагается, что спиновое состояние образующегося нуклона не фиксируется (напомним квантовые числа нуклона и пиона: $J_N^P = (1/2)^+$, $J_\pi^P = 0^-$).

5.34. В распаде $X \rightarrow a + B$ бесспиновой частицы X спин частицы a также равен нулю, а у частицы B спин равен j . Найти поляризационную матрицу плотности частицы B при

а) фиксированном выборе в пространстве оси квантования z ;

б) выборе оси квантования вдоль направления относительного движения продуктов распада (в системе покоя X).

В случае а) найти также элементы матрицы плотности, усредненные по направлениям вылета продуктов распада.

5.35. В условиях предыдущей задачи частица B в свою очередь распадается на две бесспиновые частицы: $B \rightarrow b + c$. Найти функцию распределения по значениям угла γ между векторами \mathbf{p}_a — импульса частицы a в системе покоя X и \mathbf{p}_b — импульса частицы b в системе покоя B (так что $\cos \gamma = \mathbf{p}_a \mathbf{p}_b / p_a p_b$),

⁶⁾ Обратим внимание на то, что векторы \mathbf{p}_a и \mathbf{p}_b определены по отношению к различным системам отсчета.

описывающую корреляцию между направлениями вылета этих частиц.

5.36. Установить соотношение между спиновыми матрицами плотности $\hat{\rho}^{(a, b)}(\mathbf{n})$ частиц a и b , имеющих спин $1/2$ и образующихся в распаде $X \rightarrow a + b$ бесспиновой частицы X (вектор \mathbf{n} направлен вдоль относительного импульса частиц a и b). Обсудить случаи, когда а) четность в распаде сохраняется; б) распад происходит с несохранением четности.

Г л а в а 6

ИЗМЕНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВО ВРЕМЕНИ

Изменение во времени состояний квантовомеханических систем может быть описано несколькими различными способами.

В *шрёдингеровском представлении* волновая функция (вектор состояния) изменяется во времени в соответствии с уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t) = \hat{H} \Psi(q, t), \quad (\text{VI. 1})$$

а операторы динамических переменных: координат \hat{q}_i , импульсов \hat{p}_i , спина \hat{s}_i от времени не зависят. Если гамильтониан не зависит явно от времени, то волновая функция системы может быть записана в виде разложения¹⁾

$$\Psi(q, t) = \sum_n c(E_n) e^{-iE_n t/\hbar} \Psi_{E_n}(q) \quad (\text{VI. 2})$$

по полной системе собственных функций $\Psi_{E_n}(q)$ гамильтониана (описывающих *стационарные состояния*). Коэффициенты в нем однозначно определяются заданием волновой функции в начальный момент времени

$$c(E_n) = \int \Psi_{E_n}^*(q) \Psi(q, t=0) dt_q. \quad (\text{VI. 3})$$

Если некоторой физической величине f сопоставляется квантовомеханический оператор $\hat{f} \equiv f(\hat{q}, \hat{p}, t)$, то оператор, соответствующий физической величине

¹⁾ По поводу формы записи разложения см. подстрочное примечание на стр. 12.

$\dot{f} \equiv df/dt$ (производной по времени), определяется соотношением

$$\hat{f} \equiv \dot{f} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, f]. \quad (\text{VI. 4})$$

Физическую величину, для которой $\dot{f} = 0$, называют *интегралом движения*.

Временная функция Грина $G(q, t; q', t')$, удовлетворяющая уравнению Шрёдингера по переменным q, t и начальному условию $G(q, t = t', q', t') = \delta(q - q')$, позволяет записать решение уравнения (VI. 1) в виде

$$\Psi(q, t) = \int G(q, t; q', 0) \Psi_0(q') d\tau_{q'}, \quad (\text{VI. 5})$$

где $\Psi_0(q) \equiv \Psi(q, t = 0)$. При не зависящем от времени гамильтониане для функции Грина имеем

$$G(q, t; q', t') = \sum_n e^{-iE_n(t-t')/\hbar} \Psi_{E_n}(q) \Psi_{E_n}^*(q'). \quad (\text{VI. 6})$$

В частности, для свободной частицы, $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$, временная функция Грина имеет вид

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \left(-\frac{im}{2\pi\hbar(t-t')} \right)^{3/2} \exp\left[\frac{im(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2\hbar(t-t')} \right]. \quad (\text{VI. 7})$$

В *гейзенберговском представлении*, наоборот, от времени не зависит волновая функция системы, а временная зависимость операторов динамических переменных определяется уравнениями²⁾

$$\frac{d}{dt} \hat{q}_i(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{q}_i(t)], \quad \frac{d}{dt} \hat{p}_i(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_i(t)], \quad (\text{VI. 8})$$

причем гамильтониан $\hat{H}(\hat{q}(t), \hat{p}(t), t)$ выражается уже через гейзенберговские операторы $\hat{q}(t), \hat{p}(t)$, удовлетворяющие каноническому коммутационному соотношению $[\hat{p}_i(t), \hat{q}_k(t)] = -i\hbar\delta_{ik}$. Теперь соотношение

²⁾ Чтобы различать используемое представление, у операторов динамических переменных в гейзенберговском представлении указывается на их временную зависимость: $\hat{q}(t), \hat{p}(t)$. Обозначения \hat{q}, \hat{p} сохраняются для операторов в шрёдингеровском представлении. Обычно связь этих представлений вводится таким образом, что при $t = 0$ соответствующие операторы и волновые функции состояний совпадают, сравнить с (VI. 9).

(VI.4) является уже не определением \hat{f} , а непосредственным следствием (VI.8).

Шрёдингеровское и гейзенберговское представления для описания временной эволюции системы связаны унитарным преобразованием: $\Psi(q, t) = \hat{U}(t)\Psi_0(q)$. Если гамильтониан не зависит явно от времени, то $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ и соотношение между операторами в этих представлениях имеет вид

$$\hat{f}_\Gamma(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{f}_\Gamma e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (\text{VI.9})$$

§ 1. Представление Шрёдингера.

Движение волновых пакетов

6.1. Для указанных ниже систем и их волновых функций Ψ_0 в начальный момент времени ($t = 0$):

1) частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a и $\Psi_0(x) = A \sin^3(\pi x/a)$ при $0 < x < a$,

2) плоского ротатора и $\Psi_0(\varphi) = A \sin^2 \varphi$,

3) сферического ротатора и $\Psi_0(\theta, \varphi) = A \cos^2 \theta$ найти волновые функции в произвольный момент времени. Показать, что через некоторое время T рассматриваемые системы возвращаются в исходное состояние.

6.2. Состояние свободной частицы при $t = 0$ описывается волновой функцией

$$\Psi_0(x) = A \exp(-x^2/2a^2 + ip_0x/\hbar).$$

Найти изменение состояния во времени и следующие средние: $\overline{x(t)}$, $\overline{p(t)}$, $\overline{(\Delta x(t))^2}$, $\overline{(\Delta p(t))^2}$ (см. также 6.21). Показать, что ширина волнового пакета $\overline{(\Delta x(t))^2}$ независимо от значений параметров, определяющих волновую функцию $\Psi_0(x)$, не может быть произвольно малой.

6.3. Рассмотрим при $t = 0$ нормированный волновой пакет

$$\Psi(x, t=0) = \int c(E) \Psi_E(x) dE, \quad \int |\Psi|^2 dx = 1,$$

составленный из собственных функций гамильтониана, отвечающих непрерывной части энергетического спектра. Показать, что плотность вероятности находя-

дения частицы в любой точке при $t \rightarrow \infty$ стремится к нулю. Почему это обстоятельство не противоречит сохранению нормировки волновой функции?

6.4. Состояние частицы в поле δ -ямы (см. 2.7) при $t = 0$ описывается волновой функцией $\tilde{\Psi}_0(x) = A \exp(-\beta|x|)$, $\beta > 0$. Какова вероятность $W(x)dx$ обнаружить частицу на отрезке $(x, x + dx)$ при $t \rightarrow \infty$? Найти значение интеграла $\int W(x)dx$ и сравнить его с первоначальным значением. Объяснить полученный результат.

6.5. При $t = 0$ состояние свободной частицы определяется нормированной на 1 волновой функцией $\Phi_0(p)$ в импульсном представлении. Найти асимптотическое при $t \rightarrow \infty$ поведение ее волновой функции $\Psi(x, t)$. Убедиться в сохранении нормировки. Для иллюстрации результата рассмотреть волновой пакет из 6.2.

6.6. Рассмотреть отражение волнового пакета от непроницаемой стенки, т. е. для потенциала $U = \infty$ при $x > 0$ и $U = 0$ при $x < 0$. В начальный момент времени

$$\Psi(x, t = 0) = A \exp[ip_0 x / \hbar - (x + x_0)^2 / 2a^2],$$

причем $p_0 > 0$, $x_0 > 0$ и предполагается $x_0 \gg a$, так что можно считать $\Psi(x, 0) = 0$ при $x \geq 0$.

Указание. Предварительно найти временную функцию Грина $G(x, t; x', t')$ для рассматриваемого потенциала.

6.7. Рассмотреть отражение волнового пакета от потенциальной ступеньки вида $U(x) = U_0 > 0$ при $x > 0$ и $U(x) = 0$ при $x < 0$ (рис. 8), считая, что падающий слева на барьер пакет включает с одинаковой амплитудой импульсы из интервала $p_0 \pm \Delta p$ с $\Delta p \ll p_0$ и $E_0 < U_0$. Найти *время задержки* в процессе отражения от барьера по сравнению со случаем классической частицы.

6.8. Рассмотреть процесс отражения частицы потенциалом $U(x)$. Состояние движущейся в область действия потенциала частицы описывается нормированным на единицу волновым пакетом. Считая для определенности, что в этом пакете с одинаковой амплитудой представлены импульсы частицы из интервала $p_0 \pm \Delta p$, выяснить, при каких ограничениях на Δp значения коэффициентов отражения и прохожде-

ния не зависят от его величины и определяются обычными выражениями стационарной теории, см. (II. 4).

6.9. На двухуровневую систему³⁾ (уровни невырожденные, их энергии $\epsilon_1^{(0)}$ и $\epsilon_2^{(0)}$), находящуюся в одном из стационарных состояний, при $t > 0$ начинает действовать внешнее поле. Взаимодействие \hat{V} системы с полем характеризуется матричными элементами V_{11} , V_{22} , $V_{12} = V_{21}^*$ между исходными невозмущенными состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$, причем V_{ab} от времени не зависят (при $t > 0$). Найти волновую функцию системы при $t > 0$ и вероятности нахождения ее в собственных состояниях невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 .

§ 2. Изменение во времени физических величин. Интегралы движения

6.10. Для заряженной бесспиновой частицы, находящейся в электромагнитном поле⁴⁾, найти операторы скорости \hat{v} и ускорения \hat{w} . Сравнить с выражениями классической теории.

6.11. Для нейтральной частицы со спином s , имеющей собственный магнитный момент μ_0 и движущейся в электромагнитном поле⁵⁾, найти операторы скорости \hat{v} , ускорения \hat{w} и производной по времени вектора спина \hat{s} .

6.12. Показать, что среднее значение производной по времени физической величины, не зависящей явно от времени, в стационарном состоянии дискретного спектра равно нулю. Основываясь на этом результате⁶⁾, усреднением оператора $d(\hat{p}\hat{r})/dt$ доказать

³⁾ Двухуровневая система моделирует поведение системы, энергетический спектр которой имеет два близких уровня. При не слишком сильном воздействии на систему переходы между этими и другими ее состояниями малы.

⁴⁾ Гамильтониан частицы — см. (VII. 1).

⁵⁾ Гамильтониан частицы — см. (VII. 1).

⁶⁾ В ряде случаев для конкретного вида потенциала при подходящем выборе оператора $\hat{f}(\hat{r}, \hat{p})$ из условия

$$\overline{\hat{f}} = (i/\hbar) [\hat{H}, \hat{f}] = 0$$

можно получить соотношения между различными средними; см. в связи с этим [15, с. 61].

теорему вириала для частицы, движущейся в потенциале $U = \alpha r^\nu$.

6.13. Показать, что для системы из N заряженных частиц, находящейся в n -м стационарном состоянии дискретного спектра, справедливо равенство (так называемое «правило сумм», см. также 14.11)

$$\frac{2\mu}{e^2 \hbar^2} \sum_m (E_m - E_n) |(\hat{d}_i)_{mn}|^2 = N \quad (i = 1, 2, 3),$$

где $(\hat{d}_i)_{mn}$ — матричные элементы дипольного момента системы; суммирование проводится по всем независимым стационарным состояниям системы, μ и e — масса и заряд каждой частицы.

6.14. Показать, что если не зависящий явно от времени унитарный оператор \hat{U} оставляет гамильтониан системы неизменным, так что $\hat{U}\hat{H}\hat{U}^+ = \hat{H}$, то связанный с $\hat{U} = \exp(i\hat{F})$ (см. 1.50) эрмитов оператор \hat{F} описывает сохраняющуюся величину — интеграл движения. Выяснить физический смысл интегралов движения системы из N частиц, связанных с инвариантностью ее гамильтониана относительно преобразований координат:

а) сдвига $\mathbf{r}_n \rightarrow \mathbf{r}'_n = \mathbf{r}_n + \mathbf{a}$,

б) поворота на угол $\varphi_0 = \varphi_0 \mathbf{n}_0$,

в) отражения $\mathbf{r}_n \rightarrow \mathbf{r}'_n = -\mathbf{r}_n$; $n = 1, 2, \dots, N$.

6.15. Указать механические интегралы движения для системы из N бесспиновых частиц, находящейся в следующих полях:

1) при свободном движении,

2) в поле бесконечной однородной плоскости,

3) в поле однородного шара,

4) в поле двух точек,

5) в однородном поле, зависящем от времени,

6) в поле равномерно заряженного прямого провода,

7) в поле бесконечной однородной цилиндрической винтовой линии.

6.16. Для частицы со спином $s = 1/2$, взаимодействие которой с внешним полем имеет вид⁷⁾

а) $\hat{U} = U_0(r) + U_1(r) (\hat{\sigma} \hat{\mathbf{l}})$,

б) $\hat{U} = U_0(r) + U_1(r) (\hat{\sigma} \hat{\mathbf{r}})/r$,

⁷⁾ См. также задачу 12.5.

указать интегралы движения и спин-угловую зависимость волновых функций стационарных состояний.

6.17. Показать, что если \hat{f}_1 и \hat{f}_2 — интегралы движения некоторой системы, то $\hat{g}_1 = (\hat{f}_1\hat{f}_2 + \hat{f}_2\hat{f}_1)$ и $\hat{g}_2 = i(\hat{f}_1\hat{f}_2 - \hat{f}_2\hat{f}_1)$ также являются интегралами движения.

Для иллюстрации результата указать еще один механический интеграл движения для системы, у которой сохраняются а) P_x и J_z , б) J_x и J_y ; объяснить полученный результат, исходя из свойств симметрии рассматриваемой системы.

6.18. Показать, что для частицы в однородном поле оператор $\hat{G} = \hat{p} - F_0 t$ является оператором сохраняющейся величины (F_0 — сила, действующая на частицу). Сравнить с результатом классической механики.

§ 3. Унитарные преобразования, зависящие от времени. Гейзенберговское представление

6.19. Доказать соотношение

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots$$

6.20. Для указанных ниже систем:

а) свободной частицы,

б) частицы в однородном поле, $U = -F_0 x$,

в) линейного гармонического осциллятора —

найти гейзенберговские операторы координаты и импульса следующими способами: 1) используя унитарное преобразование, связывающее шрёдингеровское и гейзенберговское представления и 2) непосредственным решением уравнений движения для гейзенберговских операторов.

6.21. Используя гейзенберговские операторы координаты и импульса, найти следующие средние: $\overline{x(t)}$, $\overline{p(t)}$, $\overline{(\Delta x(t))^2}$, $\overline{(\Delta p(t))^2}$ для указанных в предыдущей задаче систем, находящихся в состоянии с волновой функцией

$$\Psi(x) = A \exp[ip_0 x / \hbar - (x - x_0)^2 / 2a^2].$$

6.22. Исходя из уравнений движения для гейзенберговских операторов, показать, что $[\hat{p}_i(t), \hat{x}_k(t)] = -i\hbar \delta_{ik}$.

6.23. Найти значение «разновременного» коммутатора $[\hat{p}(t), \hat{x}(t')]$ для указанных в 6.20 систем.

6.24. Частица (описываемая некоторым нормированным волновым пакетом) находится в однородном, переменном во времени поле, причем сила $F(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \pm\infty$. Найти изменение среднего значения энергии частицы, вызванное действием поля. Сравнить с результатом классической механики.

6.25. На линейный осциллятор, находящийся при $t \rightarrow -\infty$ в основном состоянии, действует внешняя сила $F(t)$, причем $F(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \pm\infty$. Найти вероятности возбуждения различных стационарных состояний осциллятора и среднее значение его энергии при $t \rightarrow +\infty$. Для решения задачи воспользоваться гейзенберговским представлением и исходить из уравнений движения для операторов рождения и уничтожения $\hat{a}^+(t)$, $\hat{a}(t)$.

6.26. Найти унитарный оператор, соответствующий преобразованию Галилея, т. е. переходу в новую инерциальную систему отсчета. Убедиться в инвариантности уравнения Шрёдингера относительно этого преобразования. Как при этом преобразуется волновая функция частицы в координатном и импульсном представлениях?

6.27. Найти унитарный оператор, соответствующий калибровочному преобразованию потенциалов электромагнитного поля. Убедиться в инвариантности уравнения Шрёдингера относительно этого преобразования.

6.28. Как необходимо преобразовать оператор Гамильтона системы, чтобы при зависящем явно от времени унитарном преобразовании уравнение Шрёдингера сохранило свой вид? Сравнить с каноническими преобразованиями в классической механике.

6.29. Указать вид унитарного преобразования, описывающего переход к равномерно вращающейся системе координат. Как при этом преобразуются операторы координат, импульса, скорости и гамильтониан частицы? Сравнить с результатом классической механики. Для иллюстрации рассмотреть заряженную частицу, находящуюся в циркулярном электрическом поле, т. е. таком, что $\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$, $\mathcal{E}_y = \mathcal{E}_0 \sin \omega t$, $\mathcal{E}_z = 0$.

6.30. Гамильтониан системы имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где «невозмущенный» гамильтониан \hat{H}_0 не зависит явно от времени. Рассмотреть унитарное преобразование от шрёдингеровского представления к новому, так называемому *представлению взаимодействия*, осуществляемое⁸⁾ унитарным оператором $\hat{U} = \exp(i\hat{H}_0(t - t_0)/\hbar)$ (при $\hat{V} \equiv 0$ и $t_0 = 0$ это преобразование описывает переход к гейзенберговскому представлению).

Как изменяются во времени операторы и волновая функция системы в представлении взаимодействия?

Для иллюстрации использования этого представления рассмотреть возбуждение линейного осциллятора, находящегося при $t \rightarrow -\infty$ в основном состоянии, внешней силой $F(t)$, причем $F(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \pm\infty$. Взаимодействие $\hat{V} = -F(t)x$ считать слабым. Сравнить с результатом точного решения, см. 6.25.

§ 4. Временные функции Грина

6.31. Показать, что для не зависящего от времени гамильтониана временная функция Грина удовлетворяет уравнению⁹⁾

$$\hat{q}(-t)G(q, t; q', t' = 0) = q'G(q, t; q', 0),$$

где $\hat{q}(t)$ — гейзенберговский оператор.

Используя это соотношение, найти функцию Грина свободной частицы в координатном и импульсном представлениях. Получить ее также по формуле (VI.6). С помощью найденной функции Грина решить задачу 6.2.

Указание. Предварительно показать, что если в шрёдингеровском представлении волновая функция при $t = 0$ является собственной функцией не зависящего от времени оператора \hat{f} , то $\Psi(q, t)$ является с. ф. гейзенберговского оператора $\hat{f}(-t)$.

⁸⁾ Значение времени t_0 выбирается обычно таким образом, чтобы оно предшествовало моменту включения взаимодействия $\hat{V}(t)$, либо $t_0 = 0$.

⁹⁾ В случае нескольких степеней свободы это — система соответствующего числа уравнений.

6.32. То же, что и в предыдущей задаче, для частицы в однородном поле $U = -F_0 r$.

6.33. То же, что и в двух предыдущих задачах, для линейного гармонического осциллятора.

6.34. Найти временную функцию Грина заряженной частицы в циркулярном электрическом поле во вращающейся системе координат; см. в связи с этим задачу 6.29.

6.35. Найти временную функцию Грина заряженной частицы в однородном магнитном поле.

§ 5. Квазистационарные и квазиэнергетические состояния ¹⁰⁾

6.36. Найти сдвиг и ширину основного уровня частицы в одномерной δ -яме (см. 2.7), возникающие при наложении однородного поля $V = -F_0 x$. Поле предполагается слабым, так что $aF_0 \ll \hbar^2/ma^2$, где $a = 1/\kappa_0 = \hbar^2/m\alpha$ определяет область локализации частицы в основном состоянии (в более сильных полях при нарушении этого условия ширина уровня становится порядка энергии связи частицы и исчезают специфические свойства квазистационарного состояния на фоне непрерывного спектра).

6.37. Найти квазидискретные уровни энергии (их положение и ширину) s -состояний частицы в потенциале $U = \alpha\delta(r - a)$, см. рис. 19. Специально обсудить случай малопроницаемого барьера $m\alpha a/\hbar^2 \gg 1$ и не очень сильно возбужденных уровней. Связать ширину уровня с проницаемостью δ -барьера, см. 2.30.

6.38. Обсудить вопрос о сохранении нормировки волновой функции состояния частицы в случае, когда потенциальная энергия является комплексной функцией: $U = U_0(\mathbf{r}) - iU_1(\mathbf{r})$, где $U_{0,1}$ — вещественные функции (так называемый *оптический потенциал*).

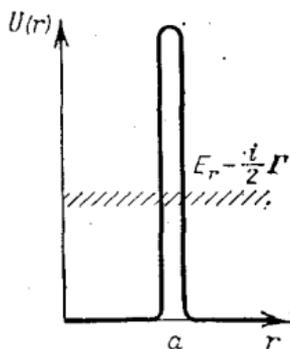


Рис. 19

¹⁰⁾ См. по этим, как и по многим другим, вопросам квантовой механики монографию А. И. Базя, Я. Б. Зельдовича и А. М. Переломова [15]. Общие представления о квазиэнергетических состояниях изложены в решении задачи 6.40, рассмотренные их в рамках теории возмущений см. в 8.41—43.

Изменение со временем нормировки волновой функции можно интерпретировать как «поглощение» или «рождение» частицы при взаимодействии. Как связан знак мнимой части потенциала с характером таких процессов?

Рассмотреть одномерную δ -яму с $U = -(\alpha_0 + i\alpha_1)\delta(x)$ и найти сдвиг и ширину основного уровня в ней, связанные с возможностью «поглощения» частицы (см. в связи с этим также следующую задачу).

6.39. Рассмотреть следующую модель системы с двумя каналами. Система состоит из двух частиц, совершающих одномерное движение. Одна из них является бесструктурной, а другая — составной, причем у нее имеется лишь два независимых состояния «внутреннего» движения, разность энергий которых равна Q_0 (сравнить с системой электрон + ядро). Волновую функцию такой системы в с. ц. и. можно рассматривать как двухкомпонентный столбец $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x, t) \\ \psi_2(x, t) \end{pmatrix}$, где $x = x_2 - x_1$ — относительная координата, а $\psi_{1,2}$ являются амплитудами нахождения составной частицы в 1-м и 2-м внутренних состояниях (соответственно этим двум возможностям и можно говорить о двух каналах). Взаимодействие частиц является точечным и описывается оператором

$$\hat{U} = -\hat{\alpha}\delta(x) = -\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} \delta(x);$$

α, β — вещественные параметры, причем $\alpha > 0$.

Найти спектр дискретных и квазидискретных уровней такой системы. Показать, что при энергиях, близких к порогу второго канала, динамика в нем может быть рассмотрена на основе (одноканального) оптического потенциала и найти его вид.

6.40. Заряженная частица находится в однородном электрическом поле $\mathcal{E}(t)$, периодически изменяющемся со временем, $\mathcal{E}(t+T) = \mathcal{E}(t)$, причем так, что среднее за период значение напряженности поля равно нулю. Найти спектр квазиэнергии и вид волновых функций квазиэнергетических состояний. Специально обсудить случаи

а) $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$;

б) $\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_0 \cos \omega t, \mathcal{E}_y = \mathcal{E}_0 \sin \omega t, \mathcal{E}_z = 0$

(электрическое поле соответственно линейно и циркулярно поляризованной монохроматической волны).

Указание. Воспользоваться описанием электрического поля с помощью векторного потенциала: $\mathcal{E}(t) = -\dot{\mathbf{A}}(t)/c$, который в случае $\overline{\mathcal{E}(t)} = 0$ является периодической функцией времени. Об изменении калибровки потенциалов см. 6.27.

6.41. Исследовать квазиэнергетические состояния (КЭС), возникающие из двукратно вырожденного уровня гамильтониана \hat{H}_0 под влиянием периодического возмущения $\hat{V}(t)$, матричные элементы которого между двумя рассматриваемыми состояниями невозмущенного гамильтониана равны¹¹⁾ $V_{11} = V_{22} = 0$, $V_{12} = V_{21} = V_0 \sin \omega t$, при этом $V_0 = V_0^*$. Выполнить разложение волновых функций КЭС по квазиэнергетическим гармоникам, см. 6.40. Наличием других состояний пренебречь, сравнить с двухуровневой системой из 6.9.

6.42. Показать, что рассмотрение квазиэнергетических состояний и вычисление спектра квазиэнергии для системы, находящейся в электрическом поле циркулярно поляризованной волны, т. е. $\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$, $\mathcal{E}_y = \mathcal{E}_0 \sin \omega t$, $\mathcal{E}_z = 0$, может быть сведено к решению стационарного уравнения Шрёдингера.

Глава 7

ДВИЖЕНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Гамильтониан заряженной частицы со спином s и спиновым магнитным моментом¹⁾ μ_0 в присутствии

¹¹⁾ Эта задача моделирует, например, влияние электрического поля $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \sin \omega t$ на заряженную частицу в потенциале с вырожденными s - и p -уровнями ($2s$ - и $2p$ -состояния с $l_z = 0$, ось z вдоль \mathcal{E}_0 , в атоме водорода). При напряженности поля, много меньшей атомной, искажение волновых функций мало и наиболее существенным является их «перемешивание» внешним полем.

¹⁾ Оператор спинного магнитного момента $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_0 \hat{\mathbf{s}}/s$, так что последнее слагаемое в (VII.1) имеет вид $-\hat{\boldsymbol{\mu}} \mathcal{H}$; для частицы с $s = 1/2$ оно равно $-\mu_0 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathcal{H}$.

Обратим также внимание на использование в решениях задач следующих обозначений: буквы m — как для массы, так и для магнитного квантового числа, а μ — как для магнитного момента, так и для массы.

магнитного поля — гамильтониан Паули — имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U - \frac{\mu_0}{s} \mathcal{H} \hat{\mathbf{s}}, \quad (\text{VII. 1})$$

при этом $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}$ и $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$.

Оператор скорости частицы $\hat{\mathbf{v}} = (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)/m$ (см. 6.10); его компоненты удовлетворяют коммутационному соотношению

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_k] = ie\hbar \epsilon_{ikl} \mathcal{H}_l / m^2 c, \quad (\text{VII. 2})$$

или в векторной форме $\hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{v}} = ie\hbar \mathcal{H} / m^2 c$.

В однородном магнитном поле \mathcal{H}_0 энергетический спектр поперечного движения²⁾ частицы является дискретным:

$$E_{l,n} = \hbar\omega_H (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{уровни Ландау}), \quad (\text{VII. 3})$$

где $\omega_H = |e| \mathcal{H}_0 / mc$, а вид собственных функций гамильтониана зависит от калибровки потенциала, см. 7.1.

Плотность тока в присутствии магнитного поля представляется в виде двух слагаемых:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{орб}} + \mathbf{j}_{\text{сп}}, \quad (\text{VII. 4})$$

где первое слагаемое связано с орбитальным движением

$$\mathbf{j}_{\text{орб}} = \frac{ie\hbar}{2m} \{ (\nabla\Psi^*) \Psi - \Psi^* \nabla\Psi \} - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \Psi^* \Psi, \quad (\text{VII. 5})$$

а второе — со спиновым магнитным моментом частицы

$$\mathbf{j}_{\text{сп}} = \frac{\mu_0}{s} c \text{rot} (\Psi^* \hat{\mathbf{s}} \Psi). \quad (\text{VII. 6})$$

§ 1. Стационарные состояния частицы в присутствии магнитного поля

7.1. Найти уровни энергии и нормированные соответствующим образом волновые функции стационарных состояний заряженной бесспиновой частицы в однородном магнитном поле (направленном вдоль

²⁾ Т. е. в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

оси z) при следующих калибровках векторного потенциала:

а) $A_x = 0$, $A_y = \mathcal{H}_0 x$, $A_z = 0$; б) $\mathbf{A} = [\mathcal{H}_0 \mathbf{r}]/2$.

Обратить внимание на дискретность энергетического спектра поперечного движения частицы и на различный характер нормировки «поперечной» части собственных функций. С чем связано такое свойство с. ф.? Сравнить со случаем стационарных состояний дискретного спектра частицы в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$.

7.2. Для заряженной частицы в постоянном однородном магнитном поле указать операторы координат центра орбиты $\hat{\rho}_0$ поперечного (перпендикулярного магнитному полю, направленному вдоль оси z) движения, квадрата радиуса-вектора этого центра $\hat{\rho}_0^2$ и квадрата радиуса орбиты $\hat{\rho}_L^2$.

Установить коммутационные соотношения для этих операторов друг с другом и с гамильтонианом. Найти спектры собственных значений операторов $\hat{\rho}_0^2$ и $\hat{\rho}_L^2$.

Охарактеризовать поперечное пространственное распределение для частицы в стационарных состояниях Ψ_{nmp_z} , рассмотренных в предыдущей задаче, в случаях: а) $m = -en/|e|$ (при этом специально обсудить значения $n \gg 1$ и произвести предельный переход к классической механике), б) $n = 0$ и $|m| \gg 1$.

7.3. Найти волновые функции стационарных состояний и соответствующие им значения энергии для заряженной бесспиновой частицы, находящейся во взаимно перпендикулярных однородных магнитном и электрическом полях.

7.4. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае параллельных полей.

7.5. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции стационарных состояний заряженного сферического осциллятора (заряженная частица в потенциале $U = kr^2/2$), находящегося в однородном магнитном поле. Исследовать предельные случаи а) слабого и б) сильного магнитных полей.

7.6. Показать, что магнитное поле $\mathcal{H}(\mathbf{r})$, отличное от нуля в ограниченной области пространства, не может «связать» заряженную бесспиновую частицу,

так что не существует стационарных состояний, в которых частица локализована в ограниченной области пространства. Почему этот результат не противоречит существованию *магнитных ловушек* для заряженных частиц в классической механике?

7.7. Как известно, в одномерном и двумерном случаях в любом поле притяжения всегда существуют связанные состояния частицы, в которых она локализована в ограниченной области пространства. В трехмерном случае таких состояний может и не быть, если потенциальная яма достаточно «мелкая».

Показать, что при наличии в пространстве однородного магнитного поля у заряженной частицы в произвольном потенциале притяжения, удовлетворяющем условиям $U(r) \leq 0$, $U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, всегда имеются стационарные состояния, в которых она локализована в ограниченной области пространства (и не только в поперечном направлении!), так что при наличии магнитного поля любая яма может «связать» частицу. В случае мелкой ямы, для которой $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$ (где U_0 , a — характерные величина и радиус потенциала), получить приближенные выражения для энергии связи частицы; в связи с этим вопросом см. также 8.61.

7.8. Найти волновые функции стационарных состояний и соответствующие значения энергии для нейтральной частицы, имеющей спин $s = 1/2$ и спиновый магнитный момент μ_0 (так что $\hat{\mu} = \mu_0 \hat{\sigma}$) в однородном магнитном поле.

7.9. То же, что и в предыдущей задаче, но для заряженной частицы со спином $s = 1/2$. Сравнить с результатами задач 7.1 и 7.8. Обратит внимание на появление дополнительного вырождения³⁾ уровней поперечного движения для частицы, имеющей магнитный момент, равный $\mu_0 = e\hbar/2mc$ (e , m — заряд и масса частицы; такое значение μ_0 , следующее из уравнения Дирака [29], имеют электрон, мюон и их античастицы).

7.10. Показать, что гамильтониан Паули (VII.1) для электрона в электромагнитном поле может быть

³⁾ Это вырождение может быть связано с *суперсимметричным* характером гамильтониана. О суперсимметрии в квантовой механике см. обзор: *Генденштейн Л. Э., Криве И. В.//УФН. — 1985. — Т. 146. — С. 553.* Характерные черты и следствия суперсимметрии рассмотрены в задачах 10.26 и 10.27.

представлен в виде

$$\hat{H} = (\hat{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c))^2/2m + e\varphi(\mathbf{r}).$$

На основании этого выражения показать также, что а) при движении электрона в стационарном однородном магнитном поле проекция спина на направление скорости является интегралом движения, б) магнитное поле $\mathcal{H}(\mathbf{r})$, отличное от нуля в ограниченной области пространства, не может «связать» электрон; сравнить с 7.6.

Сохраняются ли утверждения задачи для других частиц со спином $s = 1/2$ (протона, нейтрона и др.)?

§ 2. Изменение состояний во времени

7.11. Показать, что при движении заряженной частицы с отличными от нуля спином и спиновым магнитным моментом в однородном переменном во времени магнитном поле $\mathcal{H}(t)$ (и произвольном электрическом) зависимость волновой функции частицы от спиновых и пространственных переменных разделяется.

7.12. Найти зависимость от времени спиновой волновой функции и средних значений компонент вектора спина частицы со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ , находящейся в однородном стационарном магнитном поле (о разделении спиновых и пространственных переменных в этом случае см. предыдущую задачу).

7.13. Обобщить результат предыдущей задачи на случай нестационарного магнитного поля, направление которого остается неизменным, т. е. $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(t)\mathbf{n}_0$.

7.14. Частица со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ находится в однородном магнитном поле $\mathcal{H}(t)$ вида

$$\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_0 \cos \omega_0 t, \quad \mathcal{H}_y = \mathcal{H}_0 \sin \omega_0 t, \quad \mathcal{H}_z = \mathcal{H}_1,$$

где $\mathcal{H}_{0,1}$, ω_0 — постоянные величины.

При $t = 0$ частица находилась в состоянии с $s_z = 1/2$. Найти вероятности различных значений s_z в момент времени t . Обратит внимание на резонансный характер зависимости вероятности «переворота» спина от частоты ω_0 в случае $|\mathcal{H}_0/\mathcal{H}_1| \ll 1$.

7.15. Для заряженной частицы со спином $s = 1/2$ и спиновым магнитным моментом μ , находящейся в однородном стационарном магнитном поле, найти в гейзенберговском представлении операторы радиуса-вектора, скорости, импульса и вектора спина. Векторный потенциал выбрать в виде $\mathbf{A} = (0, \mathcal{H}_0 x, 0)$. Задачу решить одним из способов, указанных в 6.20.

Сравнить зависимость от времени средних значений векторов скорости $\overline{\mathbf{v}(t)}$ и спина $\overline{\mathbf{s}(t)}$, см. также 7.10.

7.16. В условиях задачи 7.12 найти временную спиновую функцию Грина $G_{\alpha\beta}(t, t')$ частицы ($\alpha, \beta = 1$ и 2 — спиновые переменные).

7.17. То же в условиях задачи 7.13.

7.18. Для нейтральной частицы со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ , находящейся в однородном стационарном магнитном поле, найти временную функцию Грина $G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$,

7.19. Обобщить результат предыдущей задачи на случай однородного нестационарного магнитного поля, направление которого остается неизменным, т. е. $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(t) \mathbf{n}_0$.

§ 3. Магнитное поле орбитальных токов и спинового магнитного момента

7.20. Найти средние значения компонент плотности тока для заряженной бесспиновой частицы, находящейся в однородном магнитном поле в стационарном состоянии Ψ_{nmp_z} , см. 7.1, б).

7.21. То же, что и в предыдущей задаче, для частицы со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ_0 в стационарном состоянии $\Psi_{nmp_z s_z}$ из 7.9.

7.22. Найти среднее значение магнитного поля $\mathcal{H}(0)$, создаваемого в начале координат заряженной бесспиновой частицей, находящейся в кулоновском поле ядра $U = -Ze^2/r$ в $1s$ - и $2p$ -состояниях.

7.23. Найти среднее магнитное поле, создаваемое в пространстве электроном, находящимся в основном состоянии в кулоновском поле ядра с зарядом Ze .

7.24. Найти среднее магнитное поле, создаваемое в начале координат частицей со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ_0 , находящейся в стационарном s -состоянии в произвольном центральном потенциале.

**ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ. ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД.
ВНЕЗАПНЫЕ И АДИАБАТИЧЕСКИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ**

Методы теории возмущений основаны на возможности представления гамильтониана системы в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где возмущение \hat{V} является малой поправкой, а решение уравнения Шрёдингера с невозмущенным гамильтонианом \hat{H}_0 при этом предполагается известным. Эти методы позволяют последовательными итерациями рассмотреть эффекты, связанные с действием возмущения.

В стационарном случае, когда \hat{H}_0 и \hat{V} , как и гамильтониан \hat{H} в целом, от времени не зависят, собственные значения последнего в дискретном спектре и соответствующие собственные функции¹⁾ записываются в виде рядов по степеням кратности возмущения:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots; \quad \Psi_n = \sum_m c_{nm} \Psi_m^{(0)},$$

$$c_{nm} = c_{nm}^{(0)} + c_{nm}^{(1)} + \dots,$$

где $E_n^{(0)}$, $\Psi_n^{(0)}$ — спектр и с. ф. невозмущенного гамильтониана. При этом если невозмущенный уровень $E_n^{(0)}$ не вырожден, то

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{V} | \Psi_n^{(0)} \rangle \equiv \langle n | \hat{V} | n \rangle, \quad E_n^{(2)} = \sum_m' \frac{|\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

(VIII. 1)

(в сумме отсутствует слагаемое с $m = n$), а для с. ф.

$$c_{nk}^{(0)} = \delta_{nk}, \quad c_{nn}^{(1)} = 0, \quad c_{nk}^{(1)} = \langle k | \hat{V} | n \rangle / (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}), \quad k \neq n.$$

(VIII. 2)

Условие применимости приведенных результатов ($n \neq k$):

$$|\langle k | \hat{V} | n \rangle| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|. \quad \text{(VIII. 3)}$$

¹⁾ О форме записи разложения по собственным функциям см. примечание на с. 12. Подчеркнем, что ниже матричные элементы $\langle k | \hat{V} | n \rangle$ вычисляются с собственными функциями невозмущенного гамильтониана.

Если невозмущенный уровень $E_n^{(0)}$ является s -кратно вырожденным и ему отвечают взаимно ортогональные с. ф. $\Psi_{n,\alpha}^{(0)}$, где $\alpha = 1, 2, \dots, s$, то *правильные* с. ф. нулевого приближения $\Psi_n = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^{(0)} \Psi_{n,\alpha}^{(0)}$ и соответствующие сдвиги уровней $E_n^{(1)}$ определяются решением системы уравнений

$$\sum_{\beta} (\langle n\alpha | \hat{V} | n\beta \rangle - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta}) c_{\beta}^{(0)} = 0. \quad (\text{VIII. 4})$$

Условие *совместности* ее приводит к *секулярному* уравнению

$$|\langle n\alpha | \hat{V} | n\beta \rangle - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta}| = 0. \quad (\text{VIII. 5})$$

Корни его $E_n^{(1)}$ (их число равно s) определяют расщепление уровня невозмущенного гамильтониана, а их последовательная подстановка в (VIII.4) позволяет найти волновые функции соответствующих подуровней (в нулевом приближении).

При зависящем от времени возмущении $\hat{V}(t)$ для в. ф.

$$\Psi(t) = \sum_k a_k(t) \exp(-iE_k^{(0)}t/\hbar) \Psi_k^{(0)}(q) \quad (\text{VIII. 6})$$

из уравнения Шрёдингера $i\hbar \partial\Psi/\partial t = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) \Psi$ следует²⁾

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) \exp(i\omega_{mk}t) a_k, \quad (\text{VIII. 7})$$

где $V_{mk}(t) = \int \Psi_m^{(0)*}(q) \hat{V} \Psi_k^{(0)}(q) d\tau_q$, $\omega_{mk} = (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})/\hbar$.

Решение уравнения (VIII.7) последовательными итерациями $a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + a_k^{(1)}(t) + \dots$ прежде всего дает $a_k^{(0)}(t) = \text{const.}$ Далее, считая, что $\hat{V}(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow -\infty$ и что при этом (т. е. до включения возмущения) система находилась в n -м состоянии дискретного спектра $\Psi_n^{(0)}(q)$ и поэтому $a_k(t \rightarrow -\infty) \rightarrow \delta_{nk}$, выбираем $a_k^{(0)} \equiv a_{kn}^{(0)} = \delta_{nk}$ (вместо $a_k(t)$ теперь пи-

²⁾ Подчеркнем, что временная зависимость матричных элементов $V_{kn}(t)$ определяется только оператором $\hat{V}(t)$ (множители $\exp(-iE_n^{(0)}t/\hbar)$ выделены отдельно).

шем $a_{kn}(t)$ в соответствии с рассматриваемой постановкой задачи). Для поправки первого приближения из (VIII.7) с учетом условия $a_{kn}^{(1)}(t = -\infty) = 0$ имеем

$$a_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} dt. \quad (\text{VIII.8})$$

Если при $t \rightarrow +\infty$ возмущение $\hat{V}(t)$ исчезает, то $a_{kn}^{(1)}(t = +\infty)$ определяет вероятность перехода системы из начального n -го в конечное k -е ($k \neq n$) состояние под влиянием возмущения за все время его действия

$$W^{(1)}(n \rightarrow k) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} dt \right|^2. \quad (\text{VIII.9})$$

§ 1. Стационарная теория возмущений (дискретный спектр)

8.1. Показать, что поправка первого порядка $E_n^{(1)}$ к энергетическим уровням частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме для достаточно произвольного возмущения $V(x)$ при больших значениях n не зависит от n .

8.2. Для заряженного линейного осциллятора найти сдвиги энергетических уровней в однородном электрическом поле (направленном вдоль оси колебаний) в первых двух порядках теории возмущений, а также *поляризуемости* состояний. Сравнить с точным результатом.

8.3. То же, что и в предыдущей задаче, для заряженной частицы, находящейся в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме в основном состоянии.

8.4. Для плоского изотропного осциллятора найти в первом исчезающем приближении теории возмущений сдвиг основного уровня под действием возмущения $V = \alpha xy$. Указать условия применимости полученного результата и сравнить его с точным, см. 2.49.

8.5. В условиях предыдущей задачи найти расщепление: а) первого возбужденного, б) второго возбужденного уровней осциллятора. Указать пра-

вильные собственные функции нулевого приближения.

8.6. На двухуровневую систему (уровни невырожденные, их энергии ϵ_1 и ϵ_2) накладывается возмущение, характеризующееся матричными элементами V_{11} , V_{22} , $V_{12} = V_{21}^*$ между исходными невозмущенными состояниями 1 и 2. Найти сдвиги уровней в первых двух порядках теории возмущений, указать условия применимости полученных результатов и сравнить их с точными.

8.7. Гамильтониан системы зависит от некоторого параметра λ так, что $\hat{H}(\lambda) = \hat{h} + \lambda \hat{W}$, где \hat{h} и \hat{W} от λ уже не зависят. Доказать соотношение $d^2 E_0(\lambda) / d\lambda^2 < 0$, где $E_0(\lambda)$ — основной уровень этого гамильтониана. Проиллюстрировать полученный результат на примере осциллятора и частицы в кулоновском потенциале.

8.8. Плоский ротор с моментом инерции I и электрическим дипольным моментом \mathbf{d} помещен в однородное электрическое поле \mathcal{E} , лежащее в плоскости вращения. Рассматривая действие поля как возмущение, найти поляризуемость основного состояния ротора.

8.9. В условиях предыдущей задачи найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиги и расщепления энергетических уровней возбужденных состояний ротора и их поляризуемости. Указать правильные собственные функции нулевого приближения. Обратит внимание на выделенность свойств первого возбужденного уровня.

8.10. Пространственный ротор с моментом инерции I и дипольным моментом \mathbf{d} , направленным вдоль оси ротора, помещен в однородное электрическое поле, рассматриваемое как возмущение. Найти поляризуемость основного состояния ротора.

8.11. В условиях предыдущей задачи рассчитать в первом исчезающем порядке теории возмущений сдвиги энергетических уровней возбужденных состояний ротора. Каков при этом характер снятия вырождения уровней? Происходит ли в более высоких порядках теории возмущений дальнейшее снятие вырождения?

8.12. Найти сдвиг в слабом электрическом поле и поляризуемость основного уровня заряженной частицы в одномерном δ -потенциале $U = -\alpha\delta(x)$.

8.13. Найти приближенный вид волновых функций стационарных состояний и энергетические уровни нижней части спектра плоского ротатора, имеющего дипольный момент \mathbf{d} , в сильном электрическом поле \mathcal{E} таком, что $d\mathcal{E} \gg \hbar^2/l$.

8.14. То же, что и в предыдущей задаче, но для сферического ротатора, см. 8.10.

8.15. Частица находится в центральном потенциале вида

$$a) U = -U_0/(e^{r/a} - 1), \quad б) U = -U_0 a e^{-r/a}/r,$$

причем $U_0 \gg \hbar^2/ma^2$. В первом порядке теории возмущений найти отличие энергетических уровней нижней части спектра от уровней в кулоновском поле $U = -U_0 a/r$. Обратить внимание на снятие случайного кулоновского вырождения уровней.

8.16. Для частицы в центральном потенциале $U = -\alpha/r^\nu$, причем $0 < \nu < 2$, найти энергетические уровни $E_{n_r, l}$ с большим значением момента $l \gg 1$ и с не слишком большим радиальным квантовым числом n_r . В случае кулоновского потенциала, $\nu = 1$, сравнить полученный результат с точным.

8.17. То же, что и в предыдущей задаче, но для потенциала $U = \alpha r^\nu$ с $\alpha, \nu > 0$ (теперь $E_{n_r, l} > 0$). В случае сферического осциллятора, $\nu = 2$, сравнить полученный результат с точным.

8.18. Частица находится внутри непроницаемого эллипсоида вращения, так что потенциал имеет вид

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & (x^2 + y^2)/a^2 + z^2/b^2 < 1, \\ \infty, & (x^2 + y^2)/a^2 + z^2/b^2 \geq 1, \end{cases}$$

причем $|a - b| \ll a$. Найти в первом порядке теории возмущений сдвиг основного энергетического уровня по отношению к уровню в сферической яме такого же объема.

8.19. Обобщить результат предыдущей задачи на случай возбужденных состояний частицы. Обсудить вопрос о характере снятия вырождения по проекциям момента в первом и более высоких порядках теории возмущений.

8.20. Используя теорию возмущений, получить правило квантования квадрата орбитального момента и найти вид шаровых функций в случае $l \approx |m| \gg 1$.

Указание. Свести уравнение для с. ф. и с. з. оператора \hat{I}^2 к уравнению Шрёдингера для линейного осциллятора.

§ 2. Вариационный метод

8.21. Найти вариационным методом энергию основного уровня частицы в потенциале из задачи 2.8: $U = F_0x$ для $x \geq 0$ и $U = \infty$ для $x < 0$, используя пробные функции вида

$$a) \Psi = Ax \exp(-\alpha x), \quad б) \Psi = Bx \exp(-\alpha x^2/2)$$

при $x \geq 0$. Сравнить с точным значением.

8.22. То же, что и в предыдущей задаче, для

a) δ -ямы, см. 2.7, с пробной функцией $\Psi = A(a + |x|)^{-\nu}$,

б) линейного осциллятора и $\Psi = A(a^2 + x^2)^{-\nu/2}$, ν — целое,

в) кулоновского потенциала и $\Psi = A(a + r)^{-\nu}$, a, ν — вариационные параметры.

8.23. Найти энергию: a) основного, б) первого возбужденного уровней частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме, аппроксимируя собственные функции гамильтониана простейшими полиномами, удовлетворяющими требуемым условиям.

8.24. Для двух частиц одинаковой массы m , находящихся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме и взаимодействующих друг с другом как непроницаемые точки, найти энергию основного уровня, аппроксимируя волновую функцию основного состояния простейшим полиномом, удовлетворяющим требуемым условиям. Сравнить с точным результатом, см. 2.51.

8.25. Найти вариационным методом энергию нижнего p -уровня частицы в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме радиуса a , воспользовавшись пробной радиальной функцией вида $R(r) = Ar(a^\nu - r^\nu)$ при $r \leq a$, где ν — вариационный параметр ($\Psi_{l=1, m}(\mathbf{r}) = R(r)Y_{1m}(\mathbf{n})$). Сравнить с точным значением.

8.26. Для основного состояния частицы в одномерной δ -яме, $U_0(x) = -\alpha\delta(x)$, найти вариационным методом сдвиг уровня под действием слабого однородного поля, т. е. за счет возмущения $V = -F_0x$,

воспользовавшись пробной функцией

$$\Psi(x) = C\Psi_0^{(0)}(x)(1 + \varepsilon F_0 x e^{-\gamma|x|}), \quad \Psi_0^{(0)} = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|},$$

где $\Psi_0^{(0)}$ — волновая функция невозмущенного состояния, см. 2.7, а ε и γ — вариационные параметры. Сравнить с точным результатом из 8.12.

Данная задача иллюстрирует возможность вычисления членов ряда теории возмущений для гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ вариационным способом. В связи с этим отметим, что использование в качестве пробной функции невозмущенной собственной функции воспроизводит поправку первого порядка для сдвига уровня.

8.27. Исходя из вариационного принципа и используя пробную функцию вида $\Psi(r) = Ce^{-\kappa r}$, где $\kappa > 0$ — вариационный параметр, получить достаточное условие существования в центральном потенциале $U(r)$ (причем $U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$) связанного состояния частицы. Применить полученное условие к потенциалам, рассмотренным в 4.8, и сравнить с точными результатами и с необходимым условием существования связанного состояния из 4.21.

8.28. Пусть Ψ_a с $a = 0, 1, \dots, N-1$ представляет некоторую систему из N взаимно ортогональных, нормированных на единицу волновых функций, а \bar{E}_a — среднее значение гамильтониана \hat{H} в таких состояниях. Показать, что

$$\sum_{a=0}^{N-1} \bar{E}_a \geq \sum_{n=0}^{N-1} E_n^{(0)},$$

где $E_n^{(0)}$ — точные энергетические уровни для указанного гамильтониана, и суммирование по ним проводится с учетом кратности их вырождения.

§ 3. Стационарная теория возмущений (непрерывный спектр)

8.29. Основываясь на результате задачи 2.42, получить выражения для амплитуды отраженной волны в потенциале $U(x)$ ($U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$) в первых двух порядках теории возмущений. Обсудить условия применимости теории возмущений для вычисления коэффициента отражения частицы. Рас-

смотреть приложения полученных результатов к конкретным потенциалам:

а) $U = \alpha \delta(x)$,

б) $U = \begin{cases} U_0 e^{-x/a} & \text{при } x > 0, \\ 0 & \text{при } x \leq 0, \end{cases}$

в) $U = U_0 \operatorname{ch}^{-2}(x/a)$,

г) $U = U_0 e^{-x^2/a^2}$,

и сравнить с точными решениями.

8.30. Найти коэффициент отражения $R(E)$ для быстрых частиц в случае потенциала $U(x)$, имеющего скачок в точке $x = 0$ (рис. 20). Обобщить полученный результат на случай, когда потенциал имеет

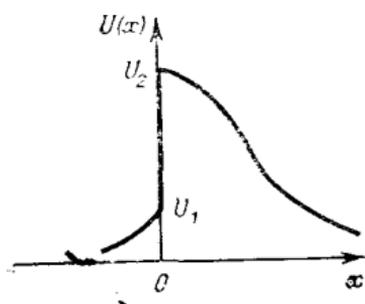


Рис. 20

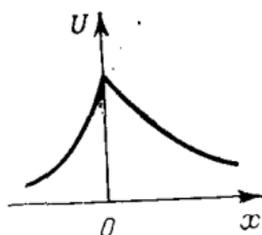


Рис. 21

разрывы в нескольких точках. Применить его к потенциалу из 8.29, б) и к прямоугольному барьеру из 2.31; сравнить с асимптотикой при $E \rightarrow \infty$ точного выражения для $R(E)$, см. также 9.27.

8.31. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае, когда потенциал имеет излом в точке $x = 0$ (рис. 21) или изломы в нескольких точках x_n . Применить полученный результат к параболическому барьеру вида $U(x) = U_0(1 - x^2/a^2)$ при $|x| < a$ и $U(x) = 0$ при $|x| > a$.

8.32. Как известно, энергетический спектр частицы в периодическом потенциале имеет зонную структуру. Для такого одномерного потенциала ($U(x+a) = U(x)$), рассматриваемого как возмущение, найти спектр $E_n(q)$; здесь n — номер зоны, $\hbar q$ — квазиимпульс (при этом $-\pi/a \leq q \leq \pi/a$). Указать связь импульса $\hbar k$ свободной частицы с квазиимпульсом $\hbar q$ и правильные собственные функции нулевого приближения $\Psi_{n,q}^{(0)}(x)$. Найти величину щели между

соседними энергетическими зонами. Рассмотреть приложения полученных результатов к потенциалу из 2.53.

§ 4. Нестационарная теория возмущений. Переходы в непрерывном спектре

8.33. Заряженный линейный осциллятор подвергается воздействию однородного электрического поля, изменяющегося во времени по закону:

а) $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \exp(-t^2/\tau^2)$,

б) $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0(1 + t^2/\tau^2)^{-1}$,

в) $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \exp(-t^2/\tau^2) \cos \omega_0 t$.

Считая, что до включения поля (при $t \rightarrow -\infty$) осциллятор находился в n -м квантовом состоянии, найти в первом порядке теории возмущений вероятности возбуждения различных его состояний при $t \rightarrow +\infty$. Для случая $n=0$ сравнить полученный результат с точным, см. 6.25.

8.34. На плоский ротатор, имеющий дипольный момент \mathbf{d} , накладывается однородное, переменное во времени электрическое поле $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}(t) \mathbf{n}_0$. До включения поля ротатор имел определенное значение энергии и проекции момента m . Вычислить в первом порядке теории возмущений вероятности различных значений проекции момента и энергии ротатора при $t \rightarrow +\infty$. Рассмотреть конкретные виды $\mathcal{E}(t)$, указанные в предыдущей задаче.

8.35. То же, что и в предыдущей задаче, но для сферического ротатора. До включения электрического поля ротатор находился в состоянии с квантовыми числами $l, l_z = m$; поле направлено вдоль оси z .

8.36. В условиях задачи 8.34 рассмотреть переходы ротатора в случае, когда вектор электрического поля вращается в плоскости вращения ротатора с угловой скоростью ω_0 , так что $\mathcal{E}_x = \mathcal{E}(t) \cos \omega_0 t$, $\mathcal{E}_y = \mathcal{E}(t) \sin \omega_0 t$. Обратить внимание на возможность существенного возрастания вероятности перехода даже в случае «плавной» зависимости $\mathcal{E}(t)$ вида а) и б) из 8.33.

8.37. Получить выражения для волновой функции и амплитуды перехода системы из начального (при $t \rightarrow -\infty$) n -го состояния дискретного спектра в ко-

нечное (при $t \rightarrow +\infty$) k -е во втором порядке нестационарной теории возмущений. Предполагается, что возмущение при $t \rightarrow \pm\infty$ отсутствует.

8.38. В условиях задачи 8.33 найти во втором порядке теории возмущений вероятности переходов осциллятора, запрещенных в первом порядке³). Сравнить их с $W^{(1)}(n \rightarrow k)$.

8.39. Если воспользоваться выражением (VIII.8), то для вероятности $W_n = |a_{nn}(+\infty)|^2$ остаться системе в первоначальном n -м состоянии получится $W_n > 1$, что противоречит сохранению нормировки волновой функции. Объяснить возникающий парадокс и получить закон сохранения нормировки волновой функции с учетом переходов в первом порядке теории возмущений.

8.40. На систему, находящуюся при $t \rightarrow -\infty$ в n_1 -м квантовом состоянии, относящемся к двукратно вырожденному уровню $E_n^{(0)}$ гамильтониана \hat{H}_0 , накладывается зависящее от времени возмущение $\hat{V}(t)$. Найти волновую функцию системы в «нулевом» приближении в произвольный момент времени⁴). Считать, что диагональные матричные элементы для вырожденных состояний удовлетворяют условию $V_{n_1, n_1} = V_{n_2, n_2} = 0$ (это имеет место, например, в случае, когда состояния $|n_{1,2}\rangle$ обладают определенной, причем противоположной четностью, а возмущение пропорционально дипольному моменту системы). Как теперь надо модифицировать формулу (VIII.8), определяющую амплитуды переходов с изменением энергии состояния?

8.41. Для периодического во времени возмущения, $\hat{V}(q, t + T) = \hat{V}(q, t)$, действующего на систему, найти волновые функции квазиэнергетических состояний⁵) (КЭС) в нулевом приближении и спектр квазиэнергии в первом порядке теории возмущений. Энергетический спектр невозмущенного гамильтониана считать дискретным, невырожденным и не содержащим уровней, отвечающих резонансному переходу: $E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \neq \pm \hbar\omega$ с $\omega = 2\pi/T$ (в связи с этим см. 8.43).

³) То есть таких переходов, для которых $W^{(1)}(n \rightarrow k) = 0$.

⁴) Сравнить с задачей об изменении волновой функции системы под влиянием резонансного возмущения, см. [1], § 40.

⁵) См. подстрочное примечание на с. 75.

8.42. В условиях предыдущей задачи найти поправку второго приближения к квазиэнергии в случае, когда $V_{nn}(t) \equiv 0$. Специально обсудить временную зависимость возмущения вида $\hat{V} = \hat{V}(q) \cos \omega t$ и рассмотреть при этом предельные случаи $\omega \rightarrow 0$ и $\omega \rightarrow \infty$. Получить выражение для динамической поляризуемости уровня в электрическом поле линейно поляризованной монохроматической волны, $\hat{V} = -\hat{d}\mathcal{E}_0 \cos \omega t$, и найти ее для осциллятора.

Указание. Для системы в электрическом поле линейно поляризованной волны динамическая поляризуемость $\beta_n(\omega)$ связана с поправкой второго приближения к квазиэнергии соотношением ⁶⁾

$$\epsilon_n^{(2)} = -\frac{1}{4} \beta_n(\omega) \mathcal{E}_0^2.$$

8.43. Рассмотреть квазиэнергетические состояния, возникающие при наложении на двухуровневую систему с энергиями $E_{1,2}^{(0)}$ периодического резонансного возмущения вида $\hat{V} = \hat{V}_0 \cos \omega t$, причем $|\omega - \omega_0| \ll \omega_0$, где $\hbar\omega_0 = E_2^{(0)} - E_1^{(0)}$. Оператор \hat{V}_0 от времени не зависит, его диагональные матричные элементы равны нулю, а $(\hat{V}_0)_{12} = V_0$, $V_0 = V_0^*$, при этом $V_0 \ll \hbar\omega_0$. Обсудить вопрос о квазиэнергетических гармониках КЭС и сравнить с задачей 6.41.

8.44. Для системы с двумя каналами, рассмотренной в задаче 6.39, в случае слабой связи каналов ($\beta \ll \alpha$) найти по теории возмущений ширину квазистационарного состояния в канале с возбужденной составной частицей. При решении задачи а) пренебречь взаимодействием в конечном состоянии, б) учесть его и сравнить полученные результаты друг с другом и с точным.

8.45. Найти в первом порядке теории возмущений вероятность «ионизации» в единицу времени из основного состояния частицы в одномерной δ -яме (см. 2.7) под действием однородного, периодического во времени поля, так что $V(x, t) = -xF_0 \cos \omega_0 t$. Решить задачу как в пренебрежении взаимодействием в конечном состоянии, так и при учете его. Сравнить со

⁶⁾ Появление здесь дополнительного, по сравнению со статическим случаем, множителя $1/2$ связано со средним значением $\overline{\cos^2 \omega t} = 1/2$, сравнить с 8.56.

случае *туннельной ионизации* в статическом однородном поле, рассмотренным в 6.36 и 9.28.

8.46. Частица находится в одномерном потенциале $U(x)$, причем $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$. Рассматривая его как возмущение, найти коэффициент отражения с помощью теории возмущений для переходов в непрерывном спектре. Указать условия применимости полученного результата и сравнить его с 8.29.

§ 5. Внезапные воздействия

8.47. Система, описываемая гамильтонианом \hat{H}_0 , находится в n -м стационарном состоянии дискретного спектра. При $t = 0$ гамильтониан системы внезапно изменяется и становится равным (при $t > 0$) $\hat{H}_f = \hat{H}_0 + \hat{V}_0$, где \hat{V}_0 , как и \hat{H}_0 , от времени не зависят. Найти вероятности различных стационарных состояний системы при $t > 0$. Каково среднее значение энергии, приобретаемой системой? Показать, что в случае малого возмущения \hat{V}_0 установленные результаты могут быть получены также в рамках нестационарной теории возмущений.

8.48. Система подвергается импульсному воздействию $\hat{V} = \hat{W}_0 \delta(t)$, так что ее гамильтониан имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}_0 \delta(t)$. При $t < 0$ система находилась в n -м состоянии дискретного спектра. Найти вероятности различных квантовых состояний при $t > 0$. В случае $\hat{W}_0 = -xP_0$ дать наглядную интерпретацию полученного результата. Сравнить его для малого возмущения \hat{V} с результатом нестационарной теории возмущений.

8.49. Частица находится в основном состоянии в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a ($0 < x < a$). В некоторый момент времени правая стенка ямы за короткий интервал времени τ смещается в точку $b > a$. Найти вероятности возбуждения различных квантовых состояний частицы после остановки стенки.

8.50. Частица находится в основном состоянии в δ -яме, так что $U = -\alpha\delta(x)$. Внезапно параметр α , характеризующий «глубину» ямы, изменяется и становится равным $\tilde{\alpha}$ (сравнить с изменением заряда ядра атома, например, при β -распаде). Найти

а) вероятность того, что частица останется в связанном состоянии, б) распределение по импульсам для частицы, вылетающей из ямы.

8.51. Частица находится в основном состоянии в δ -яме, $U = -\alpha\delta(x)$. При $t = 0$ яма приходит в движение с постоянной скоростью V . Найти вероятность того, что она увлечет частицу за собой. Рассмотреть предельные случаи малых и больших скоростей V .

8.52. На заряженный осциллятор, находящийся в основном состоянии, внезапно накладывается однородное электрическое поле, направленное вдоль оси колебаний. Найти вероятности возбуждения различных состояний осциллятора после включения поля. Сравнить с результатом задачи 6.25.

8.53. У линейного осциллятора, находящегося в основном состоянии, в момент времени $t = 0$ «точка подвеса» приходит в движение с постоянной скоростью V . Найти вероятности возбуждения различных состояний осциллятора при $t > 0$.

§ 6. Адиабатическое приближение

а) *Адиабатическое приближение в нестационарных задачах.*

8.54. Гамильтониан $\hat{H}(\hat{p}, q, \lambda(t))$ некоторой системы явно зависит от времени. Для каждого момента времени t предполагаются известными спектр собственных значений $E_n(\lambda(t))$ «мгновенного» гамильтониана, являющийся дискретным, и полная система соответствующих ортонормированных собственных функций $\Psi_n(q, \lambda(t))$.

Записать волновое уравнение для системы в представлении, базисом которого является система функций $\Psi_n(q, \lambda(t))$.

Показать, что при адиабатическом изменении гамильтониана (в пределе $\dot{\lambda} \rightarrow 0$) распределение по квантовым состояниям системы не зависит от времени. Каков классический аналог этого результата?

8.55. В условиях предыдущей задачи, считая, что при $t = t_0$ система находилась в невырожденном n -м квантовом состоянии, найти ее волновую функцию при $t > t_0$ в первом порядке адиабатической теории возмущений.

На основе полученных результатов рассмотреть возбуждение заряженного линейного осциллятора,

находящегося при $t \rightarrow -\infty$ в основном состоянии, под влиянием однородного электрического поля $\mathcal{E}(t)$ и сравнить с точным решением, см. 6.25. Исследовать случаи зависимости $\mathcal{E}(t)$ вида, приведенного в 8.33.

8.56. В условиях задачи 8.54 временная зависимость гамильтониана является периодической. Исследовать квазиэнергетические состояния⁷⁾ в адиабатическом приближении. Энергетический спектр мгновенного гамильтониана считать дискретным и невырожденным.

8.57. Частица находится в поле двух сближающихся δ -ям, так что

$$U(x, t) = -\alpha [\delta(x - L(t)/2) + \delta(x + L(t)/2)].$$

При $t \rightarrow -\infty$ ямы находились на бесконечно большом расстоянии друг от друга, а частица была связана одной из них. Расстояние $L(t)$ между ямами медленно уменьшается, и в некоторый момент времени ямы «сливаются» в одну: $U(x) = -2\alpha\delta(x)$. Какова вероятность того, что при этом частица останется в связанном состоянии?

б) *Адиабатическое приближение в стационарных задачах.*

8.58. Гамильтониан системы, состоящей из двух подсистем, имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_1(x) + V(x, \xi) + \hat{H}_2(\xi),$$

где x, ξ — координаты 1-й и 2-й подсистем, $V(x, \xi)$ описывает взаимодействие между ними. Считая характерные частоты 1-й («быстрой») подсистемы много большими характерных частот 2-й («медленной») подсистемы, свести задачу приближенного вычисления энергетических уровней и соответствующих им волновых функций совокупной системы к решению уравнений Шрёдингера для отдельных подсистем.

На основе полученных результатов исследовать состояния нижней части энергетического спектра для частицы, находящейся в двумерном потенциале вида

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & x^2/a^2 + y^2/b^2 \leq 1, \\ \infty, & x^2/a^2 + y^2/b^2 > 1 \end{cases}$$

в случае $b \gg a$.

⁷⁾ См. подстрочное примечание на с. 75.

8.59. Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2M} \hat{p}_y^2 + \frac{k(x^2 + y^2)}{2} + \alpha xy, \quad |\alpha| < k,$$

причем $M \gg m$ (два связанных осциллятора с сильно различающимися массами). Найти уровни энергии системы и соответствующие им волновые функции на основе адиабатического приближения. Сравнить полученный результат с точным решением, см. 2.50.

8.60. Две частицы с сильно различающимися массами $M \gg m$ находятся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a и взаимодействуют друг с другом как взаимно непроницаемые точки. Найти энергетические уровни нижней части спектра и соответствующие им волновые функции.

8.61. Используя адиабатическое приближение, обсудить вопрос об энергетическом спектре и виде соответствующих волновых функций связанных состояний частицы в центральном потенциале притяжения $U(r)$ в присутствии достаточно сильного однородного магнитного поля.

Найти сдвиги уровней Ландау под влиянием короткодействующего потенциала, а также основной уровень атома водорода в сильном магнитном поле.

Глава 9

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Два независимых решения одномерного уравнения Шрёдингера¹⁾ (II.1) в квазиклассическом приближении имеют вид

$$\Psi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \pm \frac{i}{\hbar} \int_c^x p(x) dx \right\},$$

$$p = \sqrt{2m[E - U(x)]}. \quad (\text{IX. 1})$$

Условие применимости этого приближения

$$|d\kappa/dx| \equiv \hbar |dp^{-1}/dx| = m\hbar |U'(x)/p^3(x)| \ll 1. \quad (\text{IX. 2})$$

¹⁾ Напомним, что у.Ш. для частицы в центральном потенциале сводится к одномерному, см. (IV. 5).

Обычно всегда имеются такие области значений x , в которых оно нарушается (например, вблизи точек остановки). В связи с этим возникает проблема²⁾

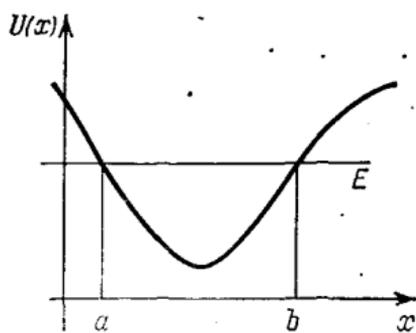


Рис. 22

сшивания квазиклассических функций, отвечающих одному и тому же решению уравнения Шрёдингера по разные стороны от таких областей. Часто применимы условия сшивания, основанные на линейной аппроксимации потенциала в окрестности точек остановки классического движения³⁾. Для самой правой

точки остановки, типа $x = b$ на рис. 22, они имеют вид

$$\Psi(x) = \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x)| dx\right\}, \quad x > b; \quad (\text{IX. 3a})$$

$$\Psi = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right\}, \quad x < b. \quad (\text{IX. 3b})$$

Для левой точки остановки, $x = a$ на рис. 22:

$$\Psi = \frac{C_1}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p(x)| dx\right\}, \quad x < a; \quad (\text{IX. 4a})$$

$$\Psi = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right\}, \quad x > a. \quad (\text{IX. 4b})$$

В случае потенциальной ямы приведенного на рис. 22 вида, из условия совпадения выражений (IX.3б) и (IX.4б) (описывающих одно и то же решение у Ш.): кратности π суммы фаз синусов в

²⁾ Ее решение требуется, в частности, для учета граничных условий.

³⁾ При этом предполагается, что на таком удалении от точки остановки, где еще справедливо линейное разложение потенциала, уже выполнено условие квазиклассичности (IX. 2).

них, следует правило квантования Бора — Зоммерфельда⁴⁾

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m[E_n - U(x)]} dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{IX.5})$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

Хотя формально квазиклассические правила квантования определяют спектр E_n лишь для $n \gg 1$, обычно результат и при $n \sim 1$ имеет достаточно высокую точность.

Дифференцирование в (IX.5) по n определяет расстояние между соседними уровнями $\delta E_n \equiv E_{n+1} - E_n = \hbar \omega(E_n)$, где $\omega(E_n) = 2\pi/T(E_n)$ — частота движения классической частицы с энергией E_n , T — его период.

Для волновой функции связанного состояния обычно можно использовать следующее простое выражение (сравнить с (IX.3, 4)):

$$\Psi_n(x) \approx \begin{cases} \frac{C_n}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right), & a < x < b; \\ 0, & x < a, x > b, \end{cases} \quad (\text{IX.6})$$

пренебрегая возможностью проникновения частицы в классически запрещенную область, где волновая функция экспоненциально убывает. Для нормировки в. ф. на единицу следует выбрать $C_n^2 = 2m\omega(E_n)/\pi$. При вычислении производных от волновой функции следует дифференцировать лишь тригонометрический множитель (синус или косинус) как наиболее быстро изменяющийся.

Проницаемость барьера, указанного на рис. 23, в квазиклассическом приближении описывается

⁴⁾ В более общем случае, когда неприменимы условия сшивания (IX.3), (IX.4), правая часть в правиле квантования равна $\pi(n + \alpha)$, где квазиклассическая поправка $\alpha \sim 1$. Именно при корректном ее учете область применимости квазиклассического результата обычно *затягивается* до значений $n \sim 1$ (в противном случае происходит существенная потеря точности даже для сравнительно больших значений $n \sim 10$).

выражением

$$D(E) = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x, E)| dx \right\}. \quad (\text{IX. 7})$$

Условием применимости этого выражения является большая величина в нем показателя экспоненты, так что $D \ll 1$. Формула (IX.7), как и (IX.5), предполагает возможность сшивания квазиклассических решений в окрестностях точек остановки, основанного на линейной аппроксимации потенциала. При нарушении этого условия квазиклассический результат (IX.7)

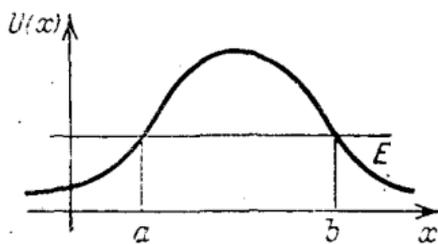


Рис. 23

справедлив лишь с точностью до предэкспоненциального множителя (но передает главное: экспоненциальную малость коэффициента прохождения барьера).

§ 1. Квантование энергетического спектра

9.1. В квазиклассическом приближении найти энергетический спектр: а) линейного осциллятора, б) связанных состояний частицы в потенциале $U(x) = -U_0 \text{ch}^{-2}(x/a)$. Сравнить с точным результатом (в случае б) см. [1, § 23]).

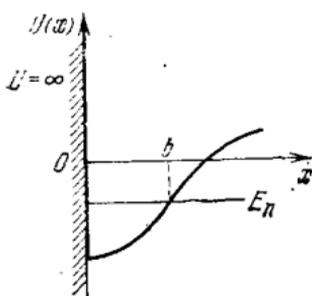


Рис. 24

9.2. Получить правило квантования энергетических уровней и найти соответствующие им квазиклассические волновые функции в случае потенциала вида⁵⁾, приведенного на рис. 24.

Применить полученный результат к потенциалу, рассмотренному в 2.8. Обратит внимание на близость квазиклассического и точного значений E_n даже при $n \sim 1$.

9.3. Частица находится в центральном поле, представляющем суперпозицию «дальнодействующего»

⁵⁾ Полученный результат непосредственно переносится и на случай s -состояний частицы в центральном потенциале, см. 4.1.

потенциала $U(r)$ вида, приведенного на рис. 24 (так что на малых расстояниях нет потенциального барьера), и «короткодействующего» потенциала, аппроксимируемого потенциалом нулевого радиуса (п. н. р., см. 4.10, а также 4.31). Получить правило квантования s -уровней и обсудить вопрос о сдвиге уровней в потенциале $U(r)$ под влиянием п. н. р. Обратить внимание на возможность *перестройки спектра*, т. е. больших сдвигов, сравнимых с расстоянием между невозмущенными уровнями.

9.4. В квазиклассическом приближении исследовать энергетический спектр частицы в симметричной потенциальной яме $U_0(x)$, разделенной δ -барьером $\alpha\delta(x)$, так что $U = U_0(x) + \alpha\delta(x)$. Рассмотреть предельные случаи а) слабо отражающего, б) малопроницаемого барьеров.

9.5. Для частицы в потенциале притяжения, имеющем на малых расстояниях кулоновский вид $U(r) \approx -\alpha/r$, получить в квазиклассическом приближении волновые функции и правило квантования s -уровней с энергией $|E| \ll m\alpha^2/\hbar^2$. Применить полученный результат к кулоновскому потенциалу $U = -\alpha/r$ и к потенциалу Хюльтена $U = -U_0/(e^{r/a} - 1)$; сравнить с точным выражением для спектра, см. 4.8.

9.6. Для центрального потенциала приведенного на рис. 24 вида (ограниченного при $r \rightarrow 0$) найти в квазиклассическом приближении радиальные функции стационарных состояний частицы с моментом $l \sim 1$ в области классического движения.

Используя полученный результат, обсудить модификацию правила квантования (IX.5) и найти энергетические спектры: а) сферического осциллятора $U = m\omega^2 r^2/2$, б) одномерного движения в потенциале: $U = U_0 \operatorname{tg}^2(\pi x/a)$ при $|x| < a/2$ и $U = \infty$ для $|x| > a/2$. Сравнить с результатом квантования по формуле (IX.5) и с точным выражением для спектра.

9.7. В предыдущей задаче для состояний частицы с моментом l в центральном потенциале $U(r)$, огра-

6) Именно этот случай и представляет самостоятельный интерес: при $l \gg 1$ центробежный барьер $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$ уже является квазиклассическим и можно воспользоваться условиями сшивания (IX.4), см. также следующую задачу.

ниченном при $r \rightarrow 0$, было получено правило квантования⁷⁾

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m \left[E_{n_r, l} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - U(r) \right]} dr = \\ = \pi \left[n_r + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(l + \frac{1}{2} - \sqrt{l(l+1)} \right) \right].$$

Показать, что с квазиклассической точностью оно эквивалентно квантованию с поправкой Лангера:

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m \left[E_{n_r, l} - \frac{\hbar^2 (l + 1/2)^2}{2mr^2} - U(r) \right]} dr = \pi \left(n_r + \frac{1}{2} \right).$$

Показать также, что оба эти соотношения с той же точностью эквивалентны более простому условию квантования

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^b \tilde{p}(r) dr \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m [E_{n_r, l} - U(r)]} dr = \\ = \pi \left(n_r + \frac{l}{2} + \frac{3}{4} \right)$$

(в котором радиальный импульс $\tilde{p}(r)$ вообще не содержит центробежного потенциала, а от величины момента l зависит лишь значение квазиклассической поправки к n_r !).

Рассчитать согласно этим правилам квантования энергетические спектры: а) сферического осциллятора $U = m\omega^2 r^2/2$, б) частицы в бесконечно глубокой сферической яме радиуса R (при этом учесть изменение условий «сшивания» для правой точки поворота $r = R$). Сравнить с точным спектром.

9.8. Для одномерного потенциала притяжения, имеющего при $|x| \rightarrow \infty$ вид $U \propto x^{-4}$, найти в квазиклассическом приближении условие появления новых состояний дискретного спектра частицы при

⁷⁾ Подчеркнем, что все три условия квантования предполагают обычное, согласно (IX.3), сшивание квазиклассических решений в правой точке поворота.

Квантование по Лангеру справедливо и для потенциалов, имеющих при $r \rightarrow 0$ вид $U(r) \approx ar^{-\nu}$ с $0 \leq \nu < 2$. Обобщение на этот случай последнего, наиболее эффективного условия квантования, приведено в решении.

углублении ямы. Применить полученный результат к потенциалу из 2.40 и сравнить с точным.

9.9. В квазиклассическом приближении найти условие появления новых связанных состояний частицы с моментом l в центральном потенциале притяжения, имеющем вид $U \approx -\alpha_2 r^{-\nu_2}$ с $\nu_2 > 2$ на больших расстояниях и $U \approx -\alpha_1 r^{-\nu_1}$ с $0 \leq \nu_1 < 2$ при $r \rightarrow 0$, по мере углубления потенциальной ямы. Проиллюстрировать результат на конкретных потенциалах.

Указание. Рассматривая случай $l \sim 1$, учесть, что при этом в основной области классического движения центробежным потенциалом можно пренебречь, см. 9.7. На малых и больших расстояниях, где нарушается квазиклассичность, воспользоваться точным решением уравнения Шрёдингера.

9.10. Исходя из правила квантования Бора — Зоммерфельда, получить выражение для смещения энергетических уровней при малом изменении потенциала на $\delta U(x)$ и установить его связь с результатом первого порядка теории возмущений. Какова интерпретация полученного выражения в рамках классической теории?

Для иллюстрации рассмотреть сдвиги уровней линейного осциллятора за счет ангармоничности $\delta U = \beta x^4$ и сравнить с точным результатом первого порядка теории возмущений.

9.11. Для частицы в симметричной потенциальной яме $U(x)$ получить в квазиклассическом приближении выражение для смещения уровней под влиянием слабого однородного электрического поля и найти поляризуемость стационарных состояний. Какова интерпретация полученного результата в рамках классической теории? Найти поляризуемости для линейного осциллятора и частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

9.12. Используя правило квантования Бора — Зоммерфельда, получить квазиклассические выражения для поправок первого и второго приближения к сдвигу уровня под влиянием возмущения $V(x)$ потенциала. Найти сдвиги уровней линейного осциллятора за счет ангармоничности $V = \alpha x^3$ и сравнить их с точным результатом второго порядка теории возмущений.

9.13. Найти следующую по \hbar квазиклассическую поправку к правилу квантования Бора — Зоммер-

фельда. Показать, что при учете ее энергия уровня оказывается равной

$$E_n = E_n^{B.-3.} + \Delta E_n, \quad \Delta E_n = \frac{\hbar^2}{24mT(E)} \frac{\partial^2}{\partial E^2} (\overline{(U'(x))^2} T(E)),$$

где черта означает усреднение с классической вероятностью, $dw = 2dx/T(E)v(x)$, при энергии $E = E_n^{B.-3.}$, определяемой правилом Бора — Зоммерфельда.

Для осциллятора с ангармоничностью вида $V = \beta x^4$ и $V = \alpha x^3$ найти следующие квазиклассические поправки к результатам задач 9.10 и 9.12.

9.14. Для потенциала притяжения, имеющего при $r \rightarrow 0$ вид $U = -\alpha/r^\nu$ с $\nu > 2$, возникает «падение на центр» (см. [1], § 35). При этом на малых расстояниях оба независимых решения радиального уравнения Шрёдингера ведут себя одинаковым образом (сравнить с $R_l \propto r^l$ и $\propto r^{-l-1}$ для регулярного потенциала с $\nu < 2$), и на первый взгляд не возникает квантования энергетического спектра, так как только одно условие убывания волновой функции в классически запрещенной области при $r \rightarrow \infty$ может быть всегда удовлетворено.

Используя «обрезание» потенциала со стороны малых r в виде непроницаемой сферы радиуса r_0 , показать, что квантование спектра возникает, но в пределе $r_0 \rightarrow 0$ для однозначного определения этих уровней необходимо фиксировать⁸⁾ положение одного из них (для каждого значения l). Получить правило квантования спектра и выяснить соответствующее ему дополнительное условие, накладываемое на волновую функцию при $r \rightarrow 0$.

Найти также энергетический спектр в потенциале $U = -\alpha/r^2$ в условиях «падения на центр».

§ 2. Квазиклассические волновые функции, вероятности и средние

9.15. Получить выражение для квазиклассической волновой функции в импульсном представлении в области характерных значений импульса частицы.

⁸⁾ Здесь проявляется то обстоятельство, что гамильтониан является эрмитовым, но не самосопряженным оператором, см. 1.29. Для его самосопряженного расширения необходимо введение дополнительного условия, что и эквивалентно фиксации положения одного из уровней.

Найти распределение по импульсам частицы в стационарном состоянии дискретного спектра. Дать классическую интерпретацию полученного результата.

9.16. В стационарном состоянии дискретного спектра найти вероятность нахождения частицы в классически запрещенной области. Применить полученный результат к линейному осциллятору.

9.17. Каково в квазиклассическом приближении среднее значение физической величины $F(x)$, являющейся функцией только координаты частицы, в n -м стационарном состоянии дискретного спектра? В качестве иллюстрации найти средние $\overline{x^2}$ и $\overline{x^4}$ для линейного осциллятора и сравнить с точными значениями.

9.18. В квазиклассическом приближении найти выражение для среднего значения физической величины $F(p)$, являющейся функцией только импульса частицы, в n -м стационарном состоянии. Вычислить средние $\overline{p^2}$ и $\overline{p^4}$ для линейного осциллятора и сравнить с точным результатом.

9.19. Какова оценка произведения неопределенностей $\Delta x \cdot \Delta p$ в стационарных квазиклассических состояниях дискретного спектра? Сравнить полученную оценку с точным значением $\sqrt{(\Delta x)^2 \cdot (\Delta p)^2}$ для линейного осциллятора и частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

9.20. В квазиклассическом приближении найти матричные элементы F_{mn} оператора вида $\hat{F} = F(x)$ в случае $|m - n| \sim 1$, т. е. между близкими по энергии стационарными состояниями дискретного спектра. Установить соотношение между ними и фурье-компонентами \tilde{F}_s функции $F(x(t))$ в классической механике:

$$F(x(t)) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \tilde{F}_s e^{is\omega t}, \quad \tilde{F}_s = \frac{1}{T} \int_0^T F(x(t)) e^{-is\omega t} dt,$$

где $T(E) = 2\pi/\omega$ — период движения в рассматриваемом поле классической частицы с энергией $E = (E_m + E_n)/2$.

Используя полученный результат, вычислить матричные элементы x_{mn} и $(x^2)_{mn}$ для осциллятора и сравнить с точными значениями.

9.21. Обобщить результат предыдущей задачи на случай оператора вида $\hat{F} = F(\hat{p})$. Применить его для

вычисления матричных элементов операторов $\hat{\rho}$ и $\hat{\rho}^2$ для осциллятора.

9.22. Частица находится в n -м стационарном состоянии в потенциале $U(x)$. Внезапно (при $t=0$) потенциальная энергия изменяется и становится равной $U(x) + V(x)$. Каковы средняя энергия частицы и ее флуктуация при $t > 0$?

Считая $n \gg 1$ и изменение потенциала достаточно большим⁹⁾, так что $|V'_{\text{хар}}(x)|(b-a) \gg \hbar\omega_n$, где $T_n = 2\pi/\omega_n$ — период движения классической частицы в исходном состоянии, найти вероятности перехода ее в новые стационарные состояния. В каком случае может происходить «ионизация» системы? Дать интерпретацию полученных результатов в рамках классической механики.

Для иллюстрации рассмотреть линейный осциллятор, $U = m\omega^2 x^2/2$, на который внезапно накладывается однородное поле, так что $V = -F_0 x$.

§ 3. Прохождение через потенциальные барьеры

9.23. Используя квазиклассическое приближение, найти проницаемости следующих потенциальных барьеров: а) треугольный барьер из 2.36; б) $U(x) = U_0 \text{ch}^{-2}(x/a)$; в) барьер из 2.35.

Указать условия применимости полученных результатов и сравнить с точными значениями для $D(E)$.

9.24. Найти предэкспоненциальный множитель в квазиклассическом выражении для коэффициента прозрачности барьера вида, приведенного на рис. 25, а, и при указанной там энергии частицы. Применить полученный результат к барьеру из 2.35 и сравнить с точным, см. также 9.23, в).

9.25. То же, что и в предыдущей задаче, но для потенциального барьера вида, приведенного на рис. 25, б). Применить полученный результат к прямоугольному барьеру из 2.31.

9.26. В квазиклассическом приближении найти для медленных частиц, $E \rightarrow 0$, проницаемость потенциального барьера, имеющего при $x \rightarrow \pm\infty$ степенное

⁹⁾ Физически это условие означает, что в исходном состоянии представлен достаточно широкий спектр состояний «конечного» гамильтониана \hat{H}_f .

убывание $U \approx U_{1,2}(a/|x|)^{\nu_{1,2}}$ с $\nu_{1,2} > 2$. Обобщить полученный результат на случай барьеров с экспоненциальным убыванием на больших расстояниях.

Указание. Воспользоваться результатом 2.39.

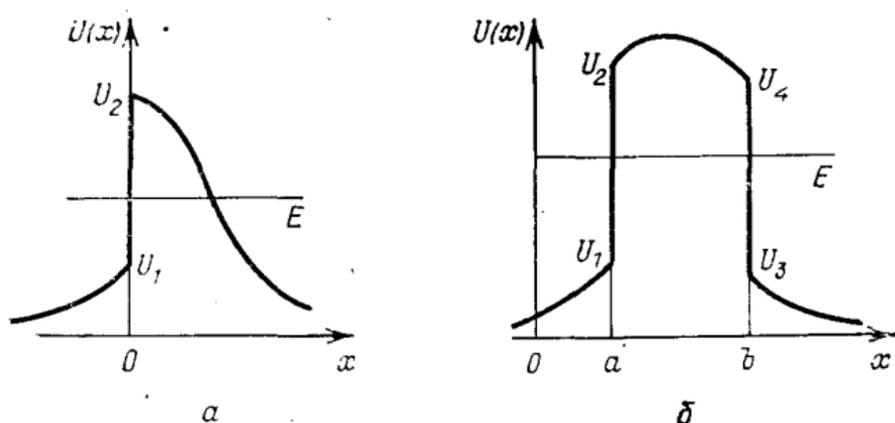


Рис. 25

9.27. В квазиклассическом приближении найти коэффициент надбарьерного отражения частиц в случае потенциала, имеющего скачок в точке $x=0$ (см., например, рис. 20). Сравнить с результатом теории возмущений из 8.30.

9.28. Используя квазиклассическое приближение, найти сдвиг и ширину основного уровня в δ -яме, $U = -\alpha\delta(x)$, возникающие при наложении слабого

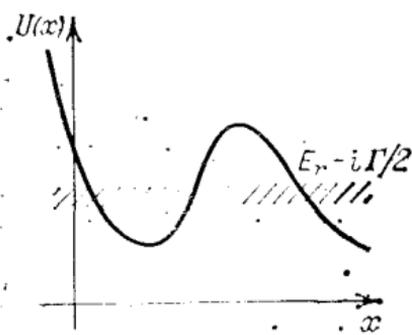


Рис. 26

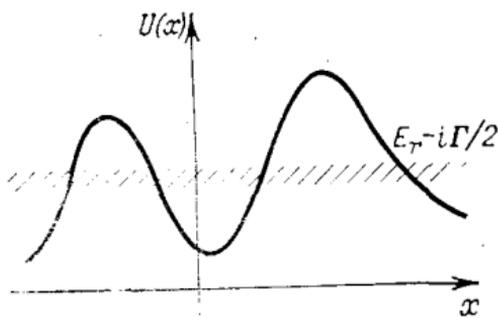


Рис. 27

однородного поля $V = -F_0x$. Сравнить полученные результаты с 6.36 и 8.12.

9.29. Получить в квазиклассическом приближении выражения для определения энергии E_{0n} и ширины Γ_n квазистационарных состояний в одномерном потенциале вида, приведенного на рис. 26. Каково их обобщение на случай, когда и слева от ямы барьер имеет конечную проницаемость (рис. 27)?

Применить полученные результаты для вычисления сдвига и ширины уровней линейного осциллятора, возникающих под влиянием слабой ангармоничности $V = -\lambda x^3$.

9.30. Оценить проницаемость центробежного барьера и время жизни квазистационарного состояния частицы (связанное с шириной уровня соотношением $\tau = \hbar/\Gamma$) в короткодействующем потенциале $U_S(r)$ радиуса r_S ; энергия состояния $E \ll \hbar^2/mr_S^2$.

9.31. Обобщить результат предыдущей задачи на случай, когда вне ямы на частицу действует кулоновский потенциал притяжения¹⁰⁾ $U_C = -\zeta e^2/r$, причем $r_S \ll a_B = \hbar^2/m\zeta e^2$; для простоты считать $|E| \ll \ll \zeta e^2/a_B$.

Г л а в а 10

ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ. ВТОРИЧНОЕ КВАНТОВАНИЕ

Волновая функция системы, включающей *тождественные* частицы, обладает определенной симметрией относительно перестановки таких частиц, так что

$$\Psi(\dots, \xi_a, \dots, \xi_b, \dots) = \pm \Psi(\dots, \xi_b, \dots, \xi_a, \dots);$$

здесь $\xi_n \equiv (\mathbf{r}_n, \sigma_n)$ — совокупность переменных (пространственных и спиновых) соответствующих частиц. При этом волновая функция симметрична при перестановке частиц с целым спином — бозонов и антисимметрична для частиц с полуцелым спином — фермионов. Соответственно в случае, когда отдельные частицы системы находятся в определенных квантовых состояниях, волновая функция системы в целом получается в результате симметризации произведения волновых функций одночастичных состояний для системы бозонов и антисимметризации — для фермионов. При этом состояние системы определяется лишь указанием занятых одночастичных состояний (для различимых частиц важен и способ распределения их по таким состояниям!).

¹⁰⁾ Такая задача возникает в теории адронных атомов (см. 11.4). При этом речь идет о проницаемости барьера, разделяющего области ядерного притяжения на расстояниях $r \leq r_S$ и кулоновского — при $r \geq a_B$. Случай кулоновского отталкивания рассмотрен в [1, § 50].

Исследование многочастичных систем, автоматически обеспечивающее квантовомеханический учет их тождественности, удобно проводить на основе *представления чисел заполнения*. Используемые при этом операторы \hat{a}_i^+ , \hat{a}_i — операторы рождения и уничтожения частиц (в соответствующих квантовых состояниях, характеризующихся индексом i) в случае бозонов удовлетворяют соотношению коммутации

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_k] = [\hat{a}_i^+, \hat{a}_k^+] = 0, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_k^+] \equiv \hat{a}_i \hat{a}_k^+ - \hat{a}_k^+ \hat{a}_i = \delta_{ik}, \quad (\text{X. 1})$$

а в случае фермионов — антикоммутационным соотношениям

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_k\} = \{\hat{a}_i^+, \hat{a}_k^+\} = 0, \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_k^+\} \equiv \hat{a}_i \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i = \delta_{ik} \quad (\text{X. 2})$$

(так что для фермионных операторов $\hat{a}_i^2 = (\hat{a}_i^+)^2 = 0$).

Операторы $\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ являются операторами числа частиц в соответствующих квантовых состояниях. Для нормированных на единицу состояний с определенными значениями чисел заполнения имеем¹⁾

$$\hat{a}_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i} | \dots, n_i - 1, \dots \rangle;$$

$$\hat{a}_i^+ | \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i + 1} | \dots, n_i + 1, \dots \rangle$$

(для фермионов $n_i = 0$ или 1 , для бозонов $n_i = 0, 1, 2, \dots$).

Для системы тождественных частиц (как бозонов, так и фермионов) оператор аддитивной физической величины, $F^{(1)} = \sum_a f_a^{(1)}$, в представлении чисел заполнения следующим образом выражается через $\Psi(\xi)$ -операторы²⁾

$$\hat{F}^{(1)} = \int \hat{\Psi}^+(\xi) \hat{f}^{(1)} \hat{\Psi}(\xi) d\xi; \quad (\text{X. 3})$$

1) Для фермионных систем здесь «опущен» фазовый множитель, см. [1], § 65.

2) Операторы $\hat{\Psi}(\xi)$, $\hat{\Psi}^+(\xi)$ являются важным частным случаем операторов \hat{a}_i , \hat{a}_i^+ , соответствующим выбору $i = r, \sigma$. Другой часто используемый выбор \hat{a}_i , \hat{a}_i^+ соответствует $i = p, \sigma$. Обобщение формул (X. 3), (X. 4) на случай произвольного a_i -оператора (вместо $\hat{\Psi}(\xi)$) состоит в использовании в них i -представления для операторов $\hat{f}^{(1)}$, $\hat{f}^{(2)}$.

здесь $\hat{f}^{(1)}$ — уже обычный одночастичный оператор в координатном представлении, операторы же $\hat{\Psi}$, $\hat{\Psi}^+$ — операторы в пространстве функций чисел заполнения и зависят от ξ как от параметра.

Для двухчастичной физической величины, $F^{(2)} = \sum_{a < b} f_{ab}^{(2)}$, оператор в представлении чисел заполнения имеет вид

$$\hat{F}^{(2)} = \frac{1}{2} \int \int \hat{\Psi}^+(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') \hat{f}^{(2)} \hat{\Psi}(\xi') \hat{\Psi}(\xi) d\xi d\xi'. \quad (\text{X. 4})$$

§ 1. Симметрия волновых функций

10.1. Для системы из двух одинаковых частиц со спином s найти число различных спиновых состояний, симметричных и антисимметричных по отношению к перестановке спиновых переменных обеих частиц.

10.2. Показать, что если n тождественных частиц со спином s находится в различных орбитальных состояниях $\varphi_1(\mathbf{r})$, $\varphi_2(\mathbf{r})$, ..., $\varphi_n(\mathbf{r})$, то общее число независимых состояний системы с учетом спиновых степеней свободы равно $G = (2s + 1)^n$ независимо от того, какой статистике подчиняются частицы.

Каково число состояний в случае различных частиц?

10.3. Пусть $\psi_{f_i}(\xi)$ являются нормированными на 1 волновыми функциями одночастичных состояний (f_i — совокупность квантовых чисел полного набора). Написать нормированные волновые функции состояний системы из трех тождественных: а) бозонов и б) фермионов, находящихся в состояниях с квантовыми числами f_1, f_2, f_3 .

10.4. Три тождественных бозона со спином $s = 1$ находятся в одинаковых орбитальных состояниях, описываемых волновой функцией $\varphi(\mathbf{r})$. Написать нормированные спиновые функции возможных состояний системы. Каково число таких независимых состояний? Каковы возможные значения суммарного спина частиц?

10.5. Какие ограничения на квантовые числа (спин J_A и внутреннюю четность P_A) нейтральной частицы A^0 следуют из факта существования распадов этой

частицы на два π^0 -мезона: $A^0 \rightarrow 2\pi^0$ (для пиона $J_\pi^P = 0^-$), сравнить с 5.30?

10.6. Установлено, что в реакции $\pi^- + d \rightarrow n + p$ захват медленного π^- -мезона (его спин $J_\pi = 0$) происходит из основного состояния мезодейтерия с сохранением четности.

Учитывая, что внутренние четности протона и нейтрона одинаковы и квантовые числа дейтрона $J_d^P = 1^+$, найти отсюда внутреннюю четность пиона.

10.7. Три тождественных бозона со спином $s = 0$, слабо взаимодействующие друг с другом, находятся в стационарных состояниях с одинаковыми квантовыми числами n_r и l , причем $l = 1$, в некотором центральном поле. Показать, что суммарный момент L системы не может принимать значения $L = 0$.

10.8. Какие значения может принимать суммарный спин S двух тождественных бозонов со спином s в состоянии с относительным орбитальным моментом L (L — момент в с. ц. и.), т. е. какие состояния ^{2s+1}L системы возможны? Рассмотреть, в частности, случай $s = 0$.

10.9. То же, что и в предыдущей задаче, но для тождественных фермионов.

10.10. Система состоит из двух одинаковых бесспиновых бозонов, находящихся в состояниях, описываемых нормированными на 1, взаимно ортогональными волновыми функциями $\psi_{1,2}(\mathbf{r})$. Какова вероятность нахождения обеих частиц в одном и том же малом объеме dV ? Сравнить ее со случаем различных частиц.

10.11. Два одинаковых бесспиновых бозона находятся в состояниях, описываемых нормированными на 1 волновыми функциями $\psi_{1,2}(\mathbf{r})$. Найти (среднюю) плотность частиц в такой системе и сравнить ее со случаем различных частиц.

§ 2. Основы формализма вторичного квантования (представление чисел заполнения)

10.12. Найти коммутационное соотношение для операторов, представляющих эрмитову и антиэрмитову части бозонного оператора уничтожения \hat{a} (или рождения \hat{a}^+).

10.13. Построить из операторов координаты \hat{x} и импульса \hat{p} частицы операторы \hat{a} и \hat{a}^+ , обладающие

свойствами бозонных операторов уничтожения и рождения.

Какова волновая функция $\Psi_0(x)$ «вакуумного» состояния?

10.14. Можно ли для преобразования вида $\hat{a}' = \hat{a}^+$, $\hat{a}'^+ = \hat{a}$ рассматривать \hat{a}' , \hat{a}'^+ как операторы уничтожения и рождения некоторых новых частиц? Провести анализ состояний $|n'\rangle$ (т. е. состояний с определенным значением n новых частиц) в базисе состояний исходных частиц. Указать вид унитарного оператора \hat{U} , осуществляющего рассматриваемое преобразование.

10.15. Найти собственные функции и собственные значения операторов рождения и уничтожения. В рассматриваемых состояниях найти распределение по числу частиц. Обсудить случаи бозонных и фермионных операторов.

Показать, что применительно к линейному осциллятору собственные функции оператора уничтожения $\hat{a} = (m\omega\hat{x} + i\hat{p})/\sqrt{2m\hbar\omega}$ описывают когерентные состояния, см. 6.21.

10.16. Является ли переход от операторов \hat{a} , \hat{a}^+ к новым операторам $\hat{a}' = \hat{a} + \alpha$, $\hat{a}'^+ = \hat{a}^+ + \alpha^*$ (α — комплексное число) унитарным преобразованием? Каков при этом вид унитарного оператора? Рассмотреть случаи как фермионных, так и бозонных операторов \hat{a} , \hat{a}^+ .

Провести анализ состояния вакуума «новых» частиц $|0'\rangle$ в базисе состояний $|n\rangle$ исходных частиц и найти распределение по числу последних.

10.17. То же, что и в предыдущей задаче, для преобразования вида $\hat{a}' = \alpha\hat{a} + \beta\hat{a}^+$, $\hat{a}'^+ = \alpha\hat{a}^+ + \beta\hat{a}$ (α , β — вещественные числа).

10.18. Произвольное одночастичное состояние $|1\rangle$ можно представить в виде $|1\rangle = \sum_i C_{f_i} \hat{a}_{f_i}^+ |0\rangle$, где $\hat{a}_{f_i}^+$

является оператором рождения частицы в состоянии Ψ_{f_i} (f_i — совокупность квантовых чисел полного набора). Какой квантовомеханический смысл имеют коэффициенты C_{f_i} ?

Рассмотреть, в частности, одночастичное состояние бесспиновой частицы вида

$$|1\rangle = \int \varphi(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) dV |0\rangle.$$

Нормировать его на 1 и вычислить среднее значение физической величины f с помощью вторично квантованного оператора (X. 3).

10.19. Операторы $\hat{a}_{f_k}^+$, \hat{a}_{f_k} и $\hat{a}_{g_k}^+$, \hat{a}_{g_k} являются операторами рождения и уничтожения частицы в состояниях, определяемых квантовыми числами f_k и g_k двух различных полных наборов. Указать соотношения между этими операторами.

10.20. Двухчастичное состояние системы тождественных бозонов (или фермионов) описывается вектором состояния $|2\rangle = \hat{a}_{f_1}^+ \hat{a}_{f_2}^+ |0\rangle$. Нормировать его на единицу. Указать вид нормированных волновых функций в координатном представлении. Рассмотреть случаи как одинаковых, так и различных квантовых чисел $f_{1,2}$.

10.21. То же, что и в предыдущей задаче, для трехчастичного состояния $|3\rangle = \hat{a}_{f_1}^+ \hat{a}_{f_2}^+ \hat{a}_{f_3}^+ |0\rangle$.

10.22. Для системы, состоящей из одинаковых частиц, найти в представлении чисел заполнения вид оператора плотности числа частиц $\hat{n}(\mathbf{r})$ (в точке \mathbf{r} пространства) и числа частиц $\hat{N}(v)$ в некотором объеме v .

10.23. Доказать коммутационные соотношения

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\Psi}(\xi)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{\Psi}(\xi), \quad [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\Psi}^+(\xi)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{\Psi}^+(\xi),$$

где $\hat{\mathbf{P}}$, $\hat{\Psi}(\xi)$ — операторы импульса и поля (Ψ -операторы) в представлении чисел заполнения для системы тождественных бозонов или фермионов.

10.24. Исследовать стационарные состояния (энергетический спектр и волновые функции) поперечного движения заряженной бесспиновой частицы в однородном магнитном поле, введя соответствующим образом выбранные операторы рождения и уничтожения³⁾. Воспользоваться выражением $\mathbf{A} = [\mathcal{H}\mathbf{r}]/2$ для векторного потенциала.

³⁾ Аналогично тому, как это делается для линейного осциллятора с выбором $\hat{a} = (m\omega x + i\hat{p})/\sqrt{2\hbar m\omega}$, приводящим гамильтониан к виду $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+ \hat{a} + 1/2)$. Для рассматриваемой задачи необходимо ввести две пары операторов рождения и уничтожения; при соответствующем их выборе гамильтониан зависит только от одной из них.

10.25. Энергетический спектр $E_{n_1, n_2} = \hbar\omega_1(n_1 + 1/2) + \hbar\omega_2(n_2 + 1/2)$ двумерного (плоского) осциллятора, $U = m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2)/2$, в случае кратных частот $\omega_1, 2$ содержит вырожденные уровни. Для частных случаев а) $\omega_1 = \omega_2$ и б) $\omega_1 = 2\omega_2$ связать это свойство спектра с симметрией гамильтониана. Указать явный вид операторов симметрии.

10.26. Рассмотреть так называемый *суперсимметричный* осциллятор, характеризуемый гамильтонианом $\hat{H} \equiv \hat{H}_B + \hat{H}_F = \hbar\omega(\hat{b}^+ \hat{b} + \hat{f}^+ \hat{f})$; здесь \hat{b} (\hat{b}^+) и \hat{f} (\hat{f}^+) — операторы уничтожения (рождения) бозона и фермиона, соответственно; $\hat{H}_B = \hbar\omega(\hat{b}^+ \hat{b} + 1/2)$ и $\hat{H}_F = \hbar\omega(\hat{f}^+ \hat{f} - 1/2)$. Спектр такого гамильтониана $E_N = \hbar\omega N$, $N = n_B + n_F$, а собственные векторы — $|n_B, n_F\rangle$. Характерные особенности спектра: $E_N \geq 0$, уровни с $E_N > 0$ двукратно вырождены, основной уровень $E_0 = 0$ невырожденный.

Указать вид операторов симметрии гамильтониана и показать, что гамильтониан может быть выражен через антикоммутатор этих операторов; объяснить свойства спектра.

Указание. Симметрия, проявляющаяся в преобразованиях, переводящих бозоны и фермионы друг в друга (и соответствующая их равноправному рассмотрению), называется *суперсимметрией*. Она обладает рядом привлекательных особенностей и с нею связывают, в частности, надежду на создание единой теории элементарных частиц (см. обзор, указанный в связи с задачей 7.9). В данной и следующей за ней задачах рассмотрены характерные черты суперсимметрии и ее проявления в простейших квантовомеханических системах.

10.27. Введем операторы

$$\hat{Q} = \hat{A}^+ \hat{f}, \quad \hat{Q}^+ = \hat{A} \hat{f}^+, \quad \hat{H} = \hat{Q} \hat{Q}^+ + \hat{Q}^+ \hat{Q},$$

где \hat{f} , \hat{f}^+ обладают свойствами фермионных операторов уничтожения и рождения, а \hat{A} , \hat{A}^+ — некоторые коммутирующие с ними операторы.

Убедиться, что рассматриваемая система⁴⁾ обладает суперсимметрией (см. предыдущую задачу).

⁴⁾ При этом \hat{H} — ее гамильтониан, а пространство векторов состояний системы определяется тем пространством, на котором определены операторы \hat{A} , \hat{f} , а тем самым и \hat{Q} , \hat{Q}^+ , \hat{H} .

Показать, что при подходящем выборе «координатных» операторов \hat{A} , \hat{A}^+ и спиновых \hat{f} , \hat{f}^+ рассматриваемый суперсимметричный гамильтониан характеризует одномерное движение частицы со спином $s = 1/2$. Каковы при этом следствия суперсимметрии?

Указание. Выбрать $\hat{f} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ и $\hat{A} = \hat{p}/\sqrt{2m} + iW(x)$.

§ 3. Системы из большого числа $N \gg 1$ частиц

10.28. В основном состоянии бозе-газа из N взаимодействующих частиц со спином $s = 0$, находящегося в объеме V , найти среднюю плотность числа частиц, среднее число частиц в некотором объеме v и флуктуацию этого числа частиц.

Задачу предлагается решить усреднением соответствующих операторов в представлении чисел заполнения.

10.29. В условиях предыдущей задачи рассмотреть пространственную корреляцию флуктуаций плотности числа частиц. Для однородной системы она характеризуется *корреляционной функцией* $v(r)$ ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$), равной

$$v(r) = \{\overline{n_1 n_2} - \bar{n}^2\} / \bar{n}, \quad n_{1,2} \equiv n(\mathbf{r}_{1,2}),$$

где \bar{n} — средняя плотность числа частиц.

Сравнить с соответствующим результатом для системы из классических частиц.

10.30. В основном состоянии идеального ферми-газа из N частиц в объеме V найти среднюю плотность числа частиц и среднее число частиц в некотором объеме v .

Задачу предлагается решить усреднением соответствующих операторов в представлении чисел заполнения.

10.31. В условиях предыдущей задачи рассмотреть корреляцию плотностей числа частиц с определенными значениями проекции спина на ось z в различных точках пространства: найти $\overline{n(\mathbf{r}_1, s_{z1}) n(\mathbf{r}_2, s_{z2})}$ и сравнить с произведением $\overline{n(\mathbf{r}_1, s_{z1})} \cdot \overline{n(\mathbf{r}_2, s_{z2})}$. Рассмотреть случаи различных и одинаковых значений s_{z1} и s_{z2} .

Найти корреляционную функцию плотности (см. 10.29).

10.32. Рассматривая взаимодействие между частицами как возмущение, найти в первом порядке теории возмущений энергию основного состояния бозе-газа, содержащего N частиц со спином $s = 0$ в объеме V (взаимодействие частиц друг с другом описывается короткодействующим парным потенциалом отталкивания $U(r) \geq 0$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$).

10.33. То же, что и в предыдущей задаче, для ферми-газа частиц со спином $s = 1/2$. Предполагается, что потенциал парного взаимодействия частиц не зависит от спина и удовлетворяет условию $k_F R_0 \ll 1$, где R_0 — радиус потенциала, $\hbar k_F$ — граничный импульс.

10.34. Идеальный ферми-газ нейтральных частиц со спином $s = 1/2$, имеющих спиновый магнитный момент μ_0 (так что $\hat{\mu} = \mu_0 \hat{\sigma}$), находится во внешнем однородном магнитном поле. Для основного состояния рассматриваемой системы найти:

- 1) числа заполнения одночастичных состояний;
- 2) магнитную восприимчивость газа (для слабого поля).

Взаимодействие магнитных моментов друг с другом пренебрежимо мало.

10.35. Выяснить характер экранировки электронами проводимости электростатического поля точечного заряда q , помещенного внутрь проводника. Воспользоваться статистическими соображениями⁵⁾, рассматривая электроны проводимости как ферми-газ (на фоне равномерного распределения положительного заряда, обеспечивающего электронейтральность проводника) при температуре $T = 0$. Искажение электронной плотности вблизи заряда считать малым.

10.36. Найти распределение заряда вблизи поверхности заряженного (с «поверхностной» плотностью заряда σ) проводника. Воспользоваться соображениями, высказанными в предыдущей задаче.

⁵⁾ Аналогичными используемым в методе Томаса — Ферми, см. главу 11, § 2, а также [1], § 70.

АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ

Большинство расчетов атомных систем основано на предположении, что отдельные электроны (а не только вся система в целом) находятся в определенных квантовых состояниях. При этом волновая функция системы записывается в виде антисимметричной комбинации произведений волновых функций таких одноэлектронных состояний. Наиболее точные расчеты в этом приближении связаны с численным решением уравнений Хартри—Фока, полученных на основе метода самосогласованного поля для одноэлектронных состояний.

Для систем с большим числом электронов простая реализация идеи самосогласованного поля лежит в основе метода Томаса—Ферми. В этом методе (средняя) электронная плотность $n(r)$ в основном состоянии нейтрального атома (или положительного атомного иона) на основе статистических соображений связана с электростатическим потенциалом системы $\varphi(r)$ соотношением¹⁾

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2} [2(\varphi - \varphi_0)]^{3/2}. \quad (\text{XI. 1})$$

Для нейтрального атома $\varphi_0 = 0$ и из электростатического уравнения Пуассона следует уравнение Томаса—Ферми ($r \neq 0$)

$$\Delta\varphi = 4\pi n = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \varphi^{3/2} \quad (\text{XI. 2})$$

(самосогласованное уравнение для потенциала). Вводя более удобные величины x и $\chi(x)$ согласно

$$r = xbZ^{-1/3}, \quad \varphi(r) = \frac{Z}{r} \chi(x) = \frac{Z^{4/3}}{b} \frac{\chi(x)}{x}, \quad (\text{XI. 3})$$

где $b = (3\pi/8 \sqrt{2})^{2/3} \approx 0,885$, Z — число электронов (заряд ядра), приводим уравнение (XI.2) к виду

$$\sqrt{x}\chi''(x) = \chi^{3/2}(x) \quad (\text{XI. 4})$$

с граничными условиями $\chi(0) = 1$ и $\chi(\infty) = 0$. Функция $\chi(x)$ является универсальной в методе Томаса—

¹⁾ Здесь (и часто не оговаривая в дальнейшем) используем атомные единицы (а. е.), $e = \hbar = m_e = 1$.

Ферми. Числовые расчеты дают $\chi'(0) = -1,588$, при этом энергия полной ионизации атома в модели Томаса — Ферми равна $E_0 = -(3\chi'(0)/7b)Z^{7/3} = 0,769Z^{7/3} = 20,92Z^{7/3}$ эВ, см. 11.21.

В этой главе представлена серия задач, связанных с исследованием свойств во внешних электрическом и магнитном полях частицы, слабо связанной (т. е. с малой энергией связи) центральным короткодействующим потенциалом. Такая одночастичная система²⁾ используется в атомной физике для моделирования отрицательных атомных ионов, в которых внешний слабосвязанный электрон рассматривается как движущийся в короткодействующем потенциале, создаваемом нейтральным атомом.

§ 1. Стационарные состояния атомов с одним и двумя электронами

11.1. Найти поправку к уровням энергии *водородоподобного* атома³⁾ за счет так называемой релятивистской зависимости массы частицы⁴⁾ от скорости в первом порядке теории возмущений.

11.2. Рассмотреть *сверхтонкую структуру* s -уровней водородоподобного атома, связанную с взаимодействием магнитных моментов электрона и ядра. Ядро имеет спин I и магнитный момент μ_0 , так что для него $\hat{\mu} = \mu_0 \hat{I}/I$ (и рассматривается как точечная частица). Оценить сверхтонкое расщепление и сравнить его с интервалом тонкой структуры (из преды-

²⁾ Многие свойства состояний частицы с малой энергией $E \ll \hbar^2/mr_S^2$, где r_S — радиус короткодействующего потенциала, определяются лишь двумя параметрами: энергией связи и так называемым *асимптотическим коэффициентом* $C_{\chi l}$ (см. 11.36, 11.37). Они, в свою очередь, связаны с параметрами низкоэнергетического рассеяния: *длиной рассеяния* a_l и *эффективным радиусом* r_l , см. (XIII. 15).

³⁾ *Водородоподобным* (и аналогично *гелиеподобным*) атомом или ионом мы называем систему, состоящую из ядра с произвольным зарядом Ze и одного (двух) электронов.

⁴⁾ Для бесспиновой частицы получаемый результат определяет *тонкую структуру* уровней водородоподобного атома. В случае же электрона, как это следует из уравнения Дирака [29], кроме такой поправки имеется еще одно слагаемое в гамильтониане, описывающее так называемое *спин-орбитальное взаимодействие*, вклад которого в смещение уровней имеет такой же порядок величины, как и рассчитанная в данной задаче поправка.

дущей задачи); магнитный момент ядра порядка $e\hbar/m_p c$, m_p — масса протона. В случае атома водорода сравнить полученный результат с экспериментальным значением сверхтонкого расщепления основного уровня $\Delta\nu_{\text{HFS}} \equiv \Delta E_{\text{HFS}}/2\pi\hbar \approx 1420$ МГц⁵⁾, магнитный момент протона равен $\mu_p = -1,396 e\hbar/m_p c$.

11.3. Вычислить в первом порядке теории возмущений сдвиги s -уровней водородоподобных атомов, обусловленные неточечностью ядра. Распределение заряда в ядре считать сферически симметричным. Оценить значение поправки, рассматривая ядро как равномерно заряженный шар радиуса $R \approx 1,2 \times 10^{-13} A^{1/3}$ см, $A \approx 2Z$, A — массовое число ядра; сравнить с результатами двух предыдущих задач.

Насколько существенна неточечность ядра для μ -мезоатома? Взаимодействие мюона, как и электрона, с ядром имеет чисто электростатический характер.

11.4. Рассмотреть сдвиги кулоновских ns -уровней пионных, и вообще адронных²⁾ атомов, вызванные короткодействующим сильным (ядерным) взаимодействием пиона с ядром. Показать, что сдвиг уровня описывается формулой теории возмущений по длине рассеяния

$$\Delta E_{ns} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} |\Psi_{ns}^{(0)}(0)|^2 a_s,$$

где $\Psi_{ns}^{(0)}(0)$ — значение невозмущенной кулоновской волновой функции, а a_s — так называемая длина рассеяния пиона на ядерном потенциале (сравнить с 4.29; обобщение на случай $l \neq 0$ см. в 13.36).

Указание. Влияние короткодействующего потенциала $U_s(r)$ радиуса r_s на уровни $E_n^{(0)} \ll \hbar^2/mr_s^2$ в далекодействующем потенциале U_L радиуса $r_L \gg r_s$ можно учесть как изменение граничного условия: вместо ограниченности волновой функции на малых расстояниях теперь $\Psi_n \propto (1 - a_s/r)$ при $r \ll r_L$. Соот-

⁵⁾ Энергия, соответствующая частоте $\nu = 1$ МГц, равна $\epsilon_0 \approx 4,136 \cdot 10^{-9}$ эВ.

⁶⁾ Адронные атомы — связанные кулоновским взаимодействием системы из двух адронов; например, пион-протонный (π - p) или протон-антипротонный ($p\bar{p}$) атомы и др. Кулоновские уровни такой системы $E_n^{(0)} = -m(\zeta e^2)^2/2\hbar^2 n^2$, где $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ — приведенная масса системы, $\zeta = -Z_1 Z_2 > 0$, $Z_{1,2}$ — заряды адронов; радиус Бора такой системы $a_B = \hbar^2 / \zeta m e^2$.

ветственно сдвиг уровня определяется лишь длиной рассеяния a_s на потенциале U_s и не зависит от его конкретного вида.

11.5. Рассчитать в первом порядке теории возмущений энергию основного состояния двухэлектронного атома (или иона), рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение. Получить значение *потенциала ионизации* системы и сравнить его с экспериментальными данными для атома гелия и ионов лития, бериллия, углерода и кислорода: $I(\text{He}) = 24,6$ эВ; $I(\text{Li}^+) = 75,6$ эВ; $I(\text{Be}^{++}) = 154$ эВ; $I(\text{C}^{4+}) = 392$ эВ; $I(\text{O}^{6+}) = 739$ эВ.

11.6. Найти энергию и потенциал ионизации основного состояния двухэлектронного атома (иона) вариационным методом. В качестве пробной функции взять произведение водородных функций с некоторым эффективным зарядом $Z_{\text{эф}}$, играющим роль вариационного параметра. Сравнить с результатом из 11.5. Можно ли сделать вывод о существовании устойчивого иона водорода H^- ?

11.7. Показать, что рассмотренная в предыдущей задаче пробная функция с эффективным зарядом $Z_{\text{эф}} = Z - 5/16$ является наилучшей из всех пробных функций вида $\Psi_{\text{проб}} \equiv \psi(r_1 + r_2)/4\pi$, т. е. зависящих только от переменной $u = r_1 + r_2$.

11.8. Найти среднюю энергию двухэлектронного иона с зарядом ядра Z в состоянии с волновой функцией

$$\Psi(r_1, r_2) = C [\exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) + \exp(-\beta r_1 - \alpha r_2)].$$

Выбрав значения параметров $\alpha = 1$, $\beta = 0,25$, доказать существование стабильного иона водорода H^- .

11.9. Оценить значения энергий и потенциалов ионизации возбужденных состояний гелиеподобных атомов в приближении, в котором взаимодействие между электронами эффективно учитывается как экранирование заряда ядра электроном, находящимся в основном, $1s$ -состоянии (при рассмотрении движения возбужденного электрона). Сравнить полученный результат с экспериментальными данными, приведенными в решении.

11.10. Найти энергию и потенциал ионизации 2^3S -состояния гелиеподобного атома вариационным методом. В качестве пробной функции взять должным образом симметризованное произведение водородных

функций $1s$ - и $2s$ -состояний с некоторым эффективным зарядом ядра $Z_{\text{эф}}$, играющим роль вариационного параметра. В случае атома гелия и иона лития Li^+ сравнить полученные результаты с экспериментальными данными (в атомных единицах): $I_{\text{He}}(2^3S) = 0,175$ и $I_{\text{Li}^+}(2^3S) = 0,610$.

11.11. Рассчитать сверхтонкое расщепление для триплетного 2^3S -состояния атома гелия с ядром ^3He ; спин ядра $I = 1/2$, магнитный момент $\mu = -1,064e\hbar/m_{\text{p.c}}$. При вычислениях воспользоваться приближенным видом волновой функции 2^3S -состояния, отвечающим пренебрежению взаимодействием электронов друг с другом. Сравнить полученный результат с экспериментальным значением величины сверхтонкого расщепления $\Delta\nu_{\text{HFS}} \equiv \Delta E_{\text{HFS}}/2\pi\hbar = 6740$ МГц.

11.12. Показать, что у гелиеподобных атомов все устойчивые возбужденные состояния, стабильные относительно распада на соответствующий водородоподобный атом и свободный электрон, имеют электронную конфигурацию $1snl$, т. е. один из электронов обязательно находится в основном, $1s$ -состоянии (неустойчивые относительно ионизации состояния атомных систем с двумя или более возбужденными электронами называют *автоионизационными*, см. 11.72).

11.13. Оценить значения потенциалов ионизации основного 2^1S - (электронная конфигурация $(1s)^22s$) и первого возбужденного 2^1P -состояний (электронная конфигурация $(1s)^22p$) литиеподобного атома, считая, что взаимодействие электронов, находящихся в основном состоянии, с возбужденным сводится эффективно к экранировке на 2 заряда ядра (для возбужденного электрона).

В случае атома лития сравнить полученные значения с экспериментальными: $I(2^1S) = 5,39$ эВ и $I(2^1P) = 3,54$ эВ.

§ 2. Многоэлектронные атомы. Статистическая модель атома

11.14. Найти возможные термы атома со следующей электронной конфигурацией (сверх заполненных оболочек):

а) np , б) $(np)^2$, в) $(np)^3$, г) $(np)^4$, д) $(np)^5$, е) $(np)^6$.

Каковы их четности? Пользуясь правилами Гунда, указать нормальный терм.

11.15. Указать атомные термы, возможные для электронной конфигурации $(nl)^2$.

11.16. Состояниям атома, имеющим электронную конфигурацию $nsn'l$ сверх заполненных оболочек, отвечают два терма: 1L и 3L (L — суммарный орбитальный момент, $L = l$). Рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение, показать, что энергия триплетного терма ниже энергии синглетного. Вид радиальных функций ns - и $n'l$ -электронов не конкретизировать.

11.17. Атом содержит сверх заполненных оболочек два эквивалентных np -электрона. Рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение, найти расположение термов 1S , 1D , 3P атома в порядке возрастания энергии. Убедиться в том, что значения квантовых чисел S и L нормального терма подтверждают правило Гунда. Показать, что энергии термов удовлетворяют соотношению

$$\Delta \equiv \frac{E(^1S) - E(^1D)}{E(^1D) - E(^3P)} = \frac{3}{2}$$

(в рассматриваемом приближении оно относится также к атомам с электронной конфигурацией $(np)^4$). Явный вид радиальной волновой функции np -электрона не конкретизировать.

Указание. При составлении правильных функций нулевого приближения, отвечающих определенному значению L орбитального момента, удобно использовать тензорный формализм (см. задачи § 4 главы 3).

11.18. То же, что и в предыдущей задаче, но для атома с тремя эквивалентными np -электронами. Показать, что энергетические расстояния между термами удовлетворяют соотношению

$$\Delta = \frac{E(^2P) - E(^2D)}{E(^2D) - E(^4S)} = \frac{2}{3}.$$

11.19. Рассмотреть статистическую модель основного состояния нейтрального атома с зарядом ядра $Z \gg 1$ в пренебрежении взаимодействием электронов друг с другом. В рамках этой модели найти:

1) электронную плотность $n(r)$ и $\overline{r^k}$ для отдельного электрона,

2) распределение электронов по импульсам $\bar{n}(\rho)$, а также $\bar{\rho}$ и $\bar{\rho}^2$,

3) характерную величину орбитального момента электрона,

4) энергию полной ионизации атома $E_{\text{полн. ион}} = -E_0$.

Обратить внимание на зависимость от Z рассчитанных величин и сравнить с результатами модели Томаса — Ферми.

В пренебрежении электрон-электронным взаимодействием получить точное выражение для энергии основного состояния атома E_0 и при $Z \gg 1$ сравнить его с результатом статистической модели.

11.20. Определить зависимость от Z числа электронов распределения Томаса — Ферми, находящихся в s -состоянии.

11.21. В модели Томаса — Ферми выразить через электронную плотность $n(r)$ кинетическую энергию электронов, энергию их взаимодействия друг с другом и с ядром, а также полную энергию $E[n(r)]$ атома.

Показать, что функция $n_0(r)$, минимизирующая функционал $E[n(r)]$, является решением уравнения Томаса — Ферми (XI.2) с $\varphi = (1/2)(3\pi^2 n_0(r))^{2/3}$, и используя это экстремальное свойство функционала, доказать в рамках модели Томаса — Ферми: а) соотношение $U_{e \text{ яд}} = -7U_{ee}$ между энергиями взаимодействия электронов друг с другом U_{ee} и с ядром $U_{e \text{ яд}}$, б) теорему вириала.

Используя пробную функцию вида ⁷⁾

$$n_{\text{проб}}(r) = \frac{\alpha \lambda^3 Z^{3/2}}{16\pi r^{3/2}} \exp(-\lambda \sqrt{rZ^{1/3}}), \quad \int n_{\text{проб}} dV = \alpha Z,$$

⁷⁾ Подчеркнем, что в рассматриваемой задаче речь идет о безусловном минимуме функционала $E[n(r)]$ без дополнительного условия о нормировке $n(r)$, при этом точная функция $n_0(r)$ оказывается автоматически нормированной на число Z электронов. Приближенная же пробная функция не обязана удовлетворять такому условию.

Отметим интересное свойство функционала энергии. В условиях данной задачи $E[n(r)]$ для нейтрального атома принимает минимальное значение. Если же ввести функционал $E[\varphi(r)]$, см. 11.22, то для нейтрального атома он, наоборот, принимает максимальное значение. Таким образом, результаты 11.21, 11.22 дают ограничения как сверху, так и снизу для энергии атома в модели Томаса — Ферми.

где α , λ — вариационные параметры, найти энергию E основного состояния нейтрального атома с зарядом ядра Z вариационным методом; сравнить с точным результатом модели Томаса — Ферми.

11.22. В рамках статистической модели нейтрального атома записать его энергию $E[\varphi(r)]$ через потенциал $\varphi(r)$ в таком виде, чтобы из условия экстремальности функционала $E[\varphi(r)]$ следовало уравнение Томаса — Ферми (XI. 2).

Используя пробную функцию

$$\varphi(r) = \frac{Z}{r} \chi(r), \quad \chi(r) = (1 + \alpha Z^{1/3} r)^{-2},$$

где α — вариационный параметр, найти энергию основного состояния атома вариационным методом, сравнить с предыдущей задачей и с точным результатом модели Томаса — Ферми.

§ 3. Основные представления теории молекул

11.23. Произвести классификацию возможных термов молекулярного иона водорода H_2^+ . Указать возможные значения орбитального момента электрона L по отношению к центру симметрии для различных термов иона.

11.24. Состояние системы из двух электронов описывается волновой функцией $\Psi = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{\alpha\beta}$, где $\chi_{\alpha\beta}$ — спиновая функция, а $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ имеет вид

а) $\psi = f(r_1, r_2);$

б) $\psi = (\mathbf{r}_1 \mathbf{n}_0 + \mathbf{r}_2 \mathbf{n}_0) f(r_1, r_2);$

в) $\psi = ([\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2] \mathbf{n}_0) f(r_1, r_2);$

г) $\psi = (\mathbf{r}_1 \mathbf{n}_0 + \mathbf{r}_2 \mathbf{n}_0) ([\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2] \mathbf{n}_0) f(r_1, r_2).$

Произвести принятую в теории двухатомных молекул классификацию указанных состояний, рассматривая постоянный вектор \mathbf{n}_0 как аналог радиуса-вектора относительного положения ядер.

11.25. Для двухатомной молекулы оценить по порядку величины отношения следующих величин:

а) интервалов между электронными, колебательными и вращательными уровнями;

б) межъядерного расстояния и амплитуды колебаний ядер;

в) характерных периодов и скоростей электронных и ядерных движений.

11.26. Считая известными следующие характеристики молекулы водорода H_2 :

1) энергию диссоциации основного состояния молекулы на два невозбужденных атома водорода $I_0 = 4,46$ эВ;

2) частоту колебаний ω_e молекулы, $\hbar\omega_e = 0,54$ эВ;

3) ротационную постоянную $B_e = 7,6 \cdot 10^{-3}$ эВ, найти соответствующие величины для молекул HD и D_2 , в которых одно или оба ядра-протоны заменены на дейтрон.

Сравнить величины эффекта изотопического смещения уровней атома и молекулы водорода.

11.27. Каковы возможные вращательные состояния молекул водорода H_2 , дейтерия D_2 и HD, находящихся в основном, Σ_g^+ -состоянии, в зависимости от значения суммарного ядерного спина молекул (спин дейтрона равен 1)? Как зависит от значения орбитального момента молекулы *знак*⁸⁾ терма?

11.28. Найти электронные термы $E(R)$ отрицательного молекулярного иона $(AB)^-$ в рамках модели, в которой взаимодействие внешнего электрона с атомами A и B аппроксимируется потенциалами нулевого радиуса, см. 4.10. Обратить внимание на:

1) возможность существования устойчивого иона $(AB)^-$ в случае, когда стабильные ионы A^- и B^- не существуют;

2) закон изменения при $R \rightarrow \infty$ разности энергий четного и нечетного термов (в случае одинаковых атомов $A \equiv B$).

11.29. Найти основной терм $E_0(R)$ молекулярного иона водорода H_2^+ вариационным методом, аппроксимируя волновую функцию терма функцией вида

$$\Psi_{\text{проб}}(r) = \sqrt{\alpha^3/\pi R^3} \exp(-\alpha r/R),$$

где r — расстояние электрона от центра отрезка, соединяющего ядра-протоны, α — вариационный параметр.

⁸⁾ Напомним, что *знак* терма — положительный или отрицательный — характеризует поведение волновой функции молекулы при одновременной инверсии координат всех электронов и ядер и определяет по своему физическому смыслу *четность* состояния молекулы.

Рассчитать минимальную энергию терма E_0 , равновесное расстояние между ядрами R_0 , энергию нулевых колебаний ядер $E_{\text{кол},0}$ и сравнить их с экспериментальными значениями: $E_0 \approx -0,60$ а. е., $R_0 \approx \approx 2,0$ а. е., $E_{\text{кол},0} \approx 0,0044$ а. е.

Можно ли на основании результата расчета сделать вывод о существовании стабильного иона H_2^+ ?

11.30. Оценить характерное расстояние между ядрами в μ -мезомолекулярном ионе водорода⁹⁾, а также значения величин ω_μ и B_μ для иона в адиабатическом приближении, воспользовавшись результатами из предыдущей задачи для обычного иона H_2^+ .

§ 4. Атомы и молекулы во внешних полях. Взаимодействие атомных систем

Атомные системы во внешнем электрическом поле.

11.31. Рассчитать поляризуемость основного состояния атома водорода вариационным методом, воспользовавшись пробными функциями

$$\begin{aligned} \text{а) } \Psi(\mathbf{r}) &= C\Psi_0(r)(1 + \alpha\mathcal{E}_0\mathbf{r}) = \\ &= C\pi^{-1/2}e^{-r}(1 + \alpha\mathcal{E}_0r \cos \theta), \\ \text{б) } \Psi(\mathbf{r}) &= C\pi^{-1/2}[e^{-r} + \alpha\gamma^{5/2}\mathcal{E}_0re^{-\gamma r} \cos \theta], \end{aligned}$$

где α , γ — вариационные параметры, $\Psi_0 = e^{-r}/\sqrt{\pi}$ — волновая функция основного состояния невозмущенного атома водорода, \mathcal{E}_0 — напряженность внешнего электрического поля. Сравнить с точным значением $\beta_0 = 9/2$ (использованы атомные единицы).

11.32. Используя известное значение $\beta_0 = 9/2$ а. е. поляризуемости основного состояния атома водорода, получить приближенное значение поляризуемости основного, 1^1S -состояния двухэлектронного атома или иона,

а) пренебрегая взаимодействием между электронами,

⁹⁾ Из-за малости размера в мезомолекулярном ионе существенно возрастает проникаемость кулоновского барьера, разделяющего ядра. Поэтому в случае, когда ядрами иона являются тяжелые изотопы водорода (d или t), мюон выступает как катализатор реакций ядерного синтеза (например, $dt \rightarrow \alpha + 17,6$ МэВ); см. в связи с этим 11.59, 11.74, а также обзор по μ -катализу: Зельдович Я. Б., Герштейн С. С. // УФН. — 1960. — Т. 71. — С. 581.

б) учитывая его резульативно как взаимное частичное экранирование заряда ядра, выбрав эффективный заряд равным $Z_{эф} = Z - 5/16$, см. 11.6. Сравнить полученные результаты с экспериментальными данными, приведенными в решении задачи.

11.33. Рассмотреть эффект Штарка для возбужденных состояний атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ в первом порядке теории возмущений. При решении задачи воспользоваться собственными функциями невозмущенного гамильтониана Ψ_{nlm} в сферических координатах. Указать правильные функции нулевого приближения и условия применимости полученных результатов.

11.34. Рассчитать вариационным способом энергетический сдвиг в однородном электрическом поле и поляризуемость связанного состояния частицы в потенциале нулевого радиуса действия, используя пробную функцию вида ¹⁰⁾

$$\Psi_{\text{проб}} = C [\Psi_0(r) + \lambda (\mathcal{E}_0 \mathbf{r}) e^{-\gamma r}], \quad \Psi_0 = \sqrt{\kappa_0/2\pi} e^{-\kappa_0 r}/r,$$

где λ , γ — вариационные параметры, Ψ_0 — волновая функция невозмущенного состояния. Сравнить с точным значением, см. следующую задачу.

11.35. Найти точное значение поляризуемости связанного состояния частицы в потенциале нулевого радиуса, см. 4.10. Применить полученный результат к иону H^- , сравнить с 11.36.

11.36. Найти поляризуемость слабосвязанного состояния заряженной частицы с моментом $l = 0$ в центральном потенциале $U_S(r)$ радиуса r_S , так что $\kappa_0 r_S \ll 1$, где $\kappa_0 = \sqrt{-2E_0^{(0)}/\hbar^2}$, $E_0^{(0)}$ — энергия невозмущенного состояния. Применить полученный результат к иону H^- .

Указание. Выразить поляризуемость через κ_0 и значение C_{κ_0} так называемого асимптотического коэффициента, определяющего асимптотику невозмущенной волновой функции $\Psi_0 \approx C_{\kappa_0} \sqrt{\kappa_0/2\pi} e^{-\kappa_0 r}/r$ на больших расстояниях (при $r_S \rightarrow 0$ имеем $C_{\kappa_0} \rightarrow 1$ и Ψ_0 переходит в волновую функцию связанного состояния в потенциале нулевого радиуса, см. 4.10).

¹⁰⁾ Обращаем внимание на то, что $\Psi_{\text{проб}}(\mathbf{r})$, как и $\Psi_0(r)$, при $r \rightarrow 0$ удовлетворяет граничному условию, определяющему потенциал нулевого радиуса, см. 4.10.

Отметим, что достаточно надежные вариационные расчеты свойств иона H^- (двухэлектронной системы) приводят к следующим результатам: $\kappa_0 = 0,235$ а. е. (энергия связи $\epsilon_0 = 0,754$ эВ), $C_{\kappa_0}^2 = 2,65$, поляризуемость $\beta_0 = 206$ а. е.; см. также 13.40.

11.37. То же, что и в предыдущей задаче, для слабо связанного состояния частицы с моментом $l = 1$.

11.38. Получить приближенные выражения для поляризуемостей возбужденных 2^3S - и 2^1S -состояний двухэлектронного атома (или иона). Сравнить с экспериментальными значениями для атома гелия и иона лития Li^+ (в ат. ед.): $\beta_{He}(2^3S) = 316$, $\beta_{He}(2^1S) = 803$, $\beta_{Li^+}(2^3S) = 47$, $\beta_{Li^+}(2^1S) = 99$.

Указание. Учесть близость $2S$ - и $2P$ -уровней и экспериментальные значения для разности их энергий: $E_{He}(2^3P) - E_{He}(2^3S) = 1,14$ эВ и $E_{He}(2^1P) - E_{He}(2^1S) = 0,602$ эВ, а также аналогичные значения 2,26 эВ и 1,29 эВ для иона Li^+ . Электрон в возбужденном состоянии рассматривать как движущийся в поле заряда ядра, экранированного на 1, а обменными эффектами пренебречь.

11.39. Оценить порядок величины поляризуемости атома и зависимость ее от заряда ядра Z в модели Томаса — Ферми. Пренебрегая взаимодействием между электронами, см. 11.19, найти значение коэффициента в полученной зависимости поляризуемости от Z . Сравнить с вкладом в поляризуемость атома валентных электронов.

11.40. Найти штарковское расщепление вращательных компонент уровней двухатомной молекулы, имеющей постоянный дипольный момент (в системе координат, жестко связанной с осью симметрии молекулы). Штарковское расщепление предполагается малым по сравнению с расстоянием между соседними вращательными уровнями, электронный терм молекулы $^1\Sigma$; сравнить с результатом задачи 8.11 для сферического ротатора.

Атомные системы во внешнем магнитном поле.

11.41. Рассмотреть эффект Зеемана для атома водорода. Магнитное поле считать настолько сильным, что зеемановское расщепление много больше тонкой структуры уровней (см. 11.1). Указать условия применимости полученных результатов.

11.42. Рассмотреть эффект Зеемана для основного уровня атома водорода с учетом его сверхтонкой структуры, см. 11.2. Обратит внимание на характер зависимости от \mathcal{H} сдвигов уровней в случае слабого: $\mu_B \mathcal{H} \ll \Delta$ и сильного: $\Delta \ll \mu_B \mathcal{H}$ внешних магнитных полей; здесь $\Delta \approx 1420$ МГц — сверхтонкое расщепление уровня.

11.43. Рассмотреть эффект Зеемана для основного уровня *позитрония* — связанного состояния системы из электрона и позитрона (аналогичной атому водорода) — с учетом его тонкой структуры¹¹). Указать правильные спиновые функции нулевого приближения при наличии магнитного поля.

11.44. Для основного уровня атома водорода найти диамагнитную часть сдвига уровня, связанную с орбитальным движением электрона.

11.45. Найти магнитную восприимчивость атома гелия в основном состоянии, используя приближенный вид волновой функции из вариационного расчета, см. 11.6. Рассчитать также магнитную восприимчивость 1 см³ газообразного гелия при нормальных условиях и сравнить ее с экспериментальным значением, равным $-8,4 \cdot 10^{-11}$.

11.46. Найти сдвиг и магнитную восприимчивость основного уровня заряженной частицы в потенциале нулевого радиуса во внешнем однородном магнитном поле. Обобщить полученный результат на случай слабосвязанного состояния частицы с моментом $l = 0$ в короткодействующем потенциале $U_S(r)$ радиуса r_S ; сравнить с 11.35 и 11.36.

11.47. Найти пара- и диамагнитный сдвиги уровня для слабосвязанного состояния заряженной частицы с моментом $l = 1$ в короткодействующем потенциале $U_S(r)$.

¹¹) Так как магнитный момент позитрона лишь знаком отличается от электронного, то магнитное взаимодействие спинов в позитронии такого же порядка величины (нет малости $\sim m_e/m_p$), как и другие релятивистские поправки в гамильтониане, так что в отличие от обычных атомов в позитронии уже не имеет смысла говорить о сверхтонкой структуре уровня. Классификация уровней позитрония по значению S (0 или 1) суммарного спина сохраняется и при учете релятивистских эффектов (*пара-* и *ортопозитроний*). Тонкое расщепление для основных уровней орто- и парапозитрония составляет $\Delta = \Delta_1 - \Delta_0 \approx \approx 8,2 \cdot 10^{-4}$ эВ.

11.48. Найти зеemanовское расщепление вращательных компонент уровней двухатомной молекулы, предполагая его малым по сравнению с расстоянием между соседними вращательными уровнями. Электронный терм молекулы $^1\Sigma$.

*Взаимодействие атомных систем на далеких расстояниях*¹²⁾.

11.49. Найти потенциал взаимодействия заряженной частицы (иона, электрона и т. д.) с невозбужденным атомом водорода на больших расстояниях друг от друга.

11.50. Найти энергию взаимодействия заряженной частицы и двухатомной молекулы, находящихся на большом расстоянии друг от друга. Предполагается, что молекула обладает постоянным дипольным моментом d (в системе координат, жестко связанной с осью молекулы) и находится в состоянии с вращательным квантовым числом $K = 0$. Электронный терм молекулы $^1\Sigma$.

11.51. Каков закон изменения с расстоянием взаимодействия заряженной частицы с атомом водорода, находящимся в возбужденном состоянии? Сравнить с 11.49.

11.52. Найти энергию взаимодействия двух атомов водорода (находящихся в основном состоянии) на большом расстоянии R друг от друга вариационным методом. При расчете воспользоваться пробной функцией вида¹³⁾

$$\Psi_{\text{проб}} = C\Psi_0(r_1)\Psi_0(r_2)[1 + \alpha(x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2)],$$

где $\Psi_0(r)$ — волновая функция основного состояния атома водорода, α — вариационный параметр; $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ — радиусы-векторы электронов первого и второго атомов относительно своих ядер, ось z направлена вдоль оси, проходящей через ядра.

11.53. Найти энергию взаимодействия на больших расстояниях двух молекул, обладающих постоянными

¹²⁾ При этом предполагается, что относительные скорости сталкивающихся составных частиц не слишком велики, так что применимо адиабатическое приближение.

¹³⁾ Рассмотрение электронов как локализованных вблизи «своих» ядер соответствует пренебрежению обменным взаимодействием, убывающим экспоненциально на больших расстояниях. Выбор пробной функции (отличие ее от невозмущенной в. ф.) отражает диполь-дипольный характер взаимодействия атомов.

дипольными моментами d_1 и d_2 (в системах координат, жестко связанных с осями молекул). Предполагается, что молекулы находятся в состояниях с вращательными квантовыми числами $K_{1,2} = 0$, а их электронные термы — $^1\Sigma$.

11.54. Рассмотреть взаимодействие, включая и обменный потенциал¹⁴), отрицательного иона с собственным атомом (система A^-A) на больших расстояниях. Валентный электрон в ионе рассматривать как слабосвязанную частицу в короткодействующем потенциале $U_s(r)$ атома, аппроксимируя его потенциалом нулевого радиуса.

11.55. Рассмотреть взаимодействие невозмущенного атома водорода с атомом водорода, находящимся в возбужденном состоянии с $n = 2$. Указать правильные функции нулевого приближения, диагонализующие оператор диполь-дипольного взаимодействия атомов.

11.56. Найти потенциал взаимодействия двух атомов на далеких расстояниях в случае, когда валентный электрон одного из атомов является слабосвязанным, так что $|E_0| \ll \hbar^2/ma_0^2$. Воспользоваться теорией возмущений по длине рассеяния, см. 11.4, и указать условия применимости полученного результата.

§ 5. Нестационарные явления в атомных системах

11.57. Атом трития (сверхтяжелого изотопа водорода) находится в основном состоянии. В результате β -распада тритон превращается в гелий: $^3\text{H} \rightarrow e + \bar{\nu} + ^3\text{He}$. Найти:

1) среднее значение энергии, приобретаемой атомным электроном при β -распаде ядра,

¹⁴) Обменным потенциалом $\Delta(R) = E_g(R) - E_u(R)$ называют разность энергий четного E_g и нечетного E_u электронных термов. Он определяет (с коэффициентом $1/2$) матричный элемент оператора взаимодействия $\langle 2 | \hat{H}(R) | 1 \rangle$, взятый между состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$, в которых электрон локализован соответственно вблизи 1-го и 2-го ядер. Наглядно этот матричный элемент (в отличие от диагональных $\langle 1(2) | \hat{H}(R) | 1(2) \rangle$) характеризует взаимодействие, при котором происходит обмен электроном между атомом и ионом (сравнить, например, с обменным потенциалом ядерного взаимодействия нуклонов [1], § 117). **Обменный потенциал играет важную роль в процессах перезарядки, см. 13.88.**

2) вероятность того, что при β -распаде образуется ион гелия He^+ , находящийся в основном состоянии,

3) вероятности образования возбужденных состояний иона гелия с главным квантовым числом $n = 2$.

При решении задачи иметь в виду, что электрон β -распада является релятивистским (энерговыведение в распаде составляет ≈ 17 кэВ).

11.58. Ядро атома, находящегося в стационарном состоянии Ψ_0 , испытывает внезапный толчок, в результате которого приобретает импульс \mathbf{P} . Выразить в общем виде вероятность перехода атома в стационарное состояние Ψ_n в результате такого «встряхивания». В случае атома водорода, первоначально находящегося в основном состоянии, вычислить суммарную вероятность возбуждения и ионизации.

11.59. Для мезомолекулярной $dt\mu$ -системы, находящейся в основном состоянии ($K = v = 0$), оценить вероятность того, что α -частица, образующаяся в реакции синтеза $dt \rightarrow p\alpha + 17,6$ МэВ, «подхватит» мюон¹⁵).

11.60. Обобщить результат 11.58 на случай двухатомной молекулы, т. е. получить общее выражение для вероятности перехода молекулы из стационарного состояния Ψ_0 в состояние Ψ_n в результате внезапного «встряхивания», при котором одному из ядер молекулы сообщается импульс \mathbf{P} (например, импульс отдачи при излучении возбужденным ядром кванта). Применить полученный результат для вычисления вероятности того, что молекула останется в исходном состоянии, если изменение скорости ядра много меньше характерных скоростей электронов в молекуле. Электронный терм молекулы $^1\Sigma$, и она находится в состоянии с квантовыми числами $K = v = 0$. Обсудить условия возбуждения вращательных и колебательных степеней свободы молекулы.

11.61. Найти изменение времени жизни основных состояний орто- и парапозитрония, см. 11.43, при наложении однородного магнитного поля.

¹⁵) Оказываясь при этом связанным в мезоатомный ион μHe , мюон перестает выступать в роли катализатора реакций синтеза. Именно это обстоятельство (а не конечность времени жизни мюона) ограничивает число актов реакций, инициируемых одним мюоном, а тем самым — и энергетическую эффективность μ -катализа, см. также 11.74.

Указание. Конечность времени жизни позитрония связана с аннигиляцией электрон-позитронной пары в фотоны. При этом в отсутствие внешних полей времена жизни орто- и парапозитрония имеют существенно различные значения: $\tau_1 \approx 1,4 \cdot 10^{-7}$ с для ортопозитрония и $\tau_0 \approx 1,2 \cdot 10^{-10}$ с для парапозитрония [29], что связано с различием каналов их распада — на три и на два фотона соответственно. Отметим также, что при наличии нескольких каналов распада полная вероятность его ω (величина, обратная времени жизни τ) равна сумме парциальных вероятностей.

11.62. Найти изменение времени жизни метастабильного $2s$ -состояния атома водорода при наложении слабого однородного электрического поля.

Указание. Возбужденные состояния атомных систем являются, строго говоря, квазистационарными состояниями, так как имеют конечное время жизни, связанное с переходом электронов на более низкие уровни с излучением фотонов. Обычно характерное время жизни составляет $\tau \sim 10^{-9}$ с; так, время жизни $2p$ -состояния атома водорода $\tau_{2p} = 1,6 \cdot 10^{-9}$ с. Однако время жизни $2s$ -состояния несоизмеримо больше: $\tau_{2s} \approx 0,1$ с и определяется переходом в основное состояние с излучением двух фотонов (см. в связи с этим задачи 14.6, 14.8). При решении задачи следует иметь в виду аномальную близость энергий $2s_{1/2}$ - и $2p_{1/2}$ -состояний, разность которых составляет $\Delta E/2\pi\hbar \approx 1058$ МГц (так называемый *лэмбовский сдвиг*).

11.63. Найти в первом порядке теории возмущений вероятность вырывания заряженной частицы, связанной потенциалом нулевого радиуса, электрическим полем монохроматической электромагнитной волны. Длина волны λ предполагается много большей области локализации частицы, так что электрическое поле можно считать однородным, изменяющимся во времени гармоническим образом.

Рассмотреть наиболее общий случай волны эллиптической поляризации. Обобщить полученный результат на случай слабосвязанного состояния частицы в короткодействующем потенциале $U_S(r)$ конечного радиуса.

Указание. Для монохроматической волны эллиптической поляризации, распространяющейся в на-

правлении оси z , электрическое поле в данной точке пространства изменяется во времени по закону

$$\mathcal{E}(t) = (\mathcal{E}_0 \cos \omega t, \zeta \mathcal{E}_0 \sin \omega t, 0),$$

где ζ — степень эллиптичности ($|\zeta| \leq 1$), а \mathcal{E}_0 — амплитудное значение напряженности поля; знак ζ определяет направление вращения вектора $\mathcal{E}(t)$. При $\zeta = 0$ волна линейно поляризована, а при $\zeta = \pm 1$ обладает круговой поляризацией.

11.64. То же, что и в предыдущей задаче, но для слабосвязанного в короткодействующем потенциале $U_S(r)$ состояния частицы с моментом $l = 1$ в поле линейно поляризованной волны¹⁶⁾; частота ее предполагается удовлетворяющей условию $\hbar\omega \ll \hbar^2/mr_S^2$, где r_S — радиус потенциала.

11.65. То же, что и в задаче 11.63, но для водородоподобного атома, находящегося в основном состоянии. При этом ограничиться случаем большой частоты внешнего поля, $\hbar\omega \gg m(Ze^2)^2/\hbar^2$, так что вылетающий электрон является быстрым.

Указание. При решении задачи воспользоваться для описания взаимодействия заряженной частицы с однородным электрическим полем оператором вида $\hat{V} = -(e/mc) \mathbf{A}(t) \hat{\mathbf{p}}$, соответствующим выбору скалярного потенциала $\varphi = 0$; при этом $\mathcal{E}(t) = -\partial \mathbf{A}(t)/c \partial t$, так что для эллиптически поляризованной монохроматической волны

$$\mathbf{A}(t) = -(c\mathcal{E}_0/\omega) (\sin \omega t, -\zeta \cos \omega t, 0).$$

Такое взаимодействие эквивалентно использованному в двух предыдущих задачах $\hat{V}' = -e\mathcal{E}(t) \mathbf{r}$ ($\mathbf{A}' = 0$, $\varphi' = -\mathcal{E}(t) \mathbf{r}$) и получается из последнего калибровочным преобразованием с $\chi = -c\mathbf{r} \int \mathcal{E}(t) dt$ (см., например, 6.27). Его преимущество, по сравнению с \hat{V}' , определяется тем, что в случае большой частоты ω , когда вылетающая частица является быстрой, при вычислении матричного элемента возмущения

¹⁶⁾ При этом волновые функции возникающих в поле волны квазистационарных состояний характеризуются определенным значением проекции момента частицы на направление электрического поля. Для них вероятность ионизации в единицу времени непосредственно связана с шириной уровня $\Gamma = \hbar\omega$.

в качестве волновой функции конечного состояния $\Psi_k^{(-)}$ можно воспользоваться плоской волной.

11.66. Найти динамическую поляризуемость $\beta_0(\omega)$ для частицы в потенциале нулевого радиуса. Обобщить полученный результат на слабосвязанное состояние частицы с моментом $l=0$ в короткодействующем потенциале $U_S(r)$ и в соответствующих предельных случаях сравнить его с 11.36 и 11.63. При решении задачи воспользоваться развитой в 8.42 теорией возмущений для квазиэнергетических состояний.

11.67. Оценить с точностью до предэкспоненциального множителя вероятность вырывания в единицу времени заряженной частицы, связанной центральным потенциалом $U(r)$ (при этом $U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$), слабым однородным электрическим полем.

11.68. Найти вероятность выбрасывания K -электрона из атома при дипольном переходе ядра из возбужденного состояния в результате прямого электростатического взаимодействия электрона с протонами ядра (*внутренняя конверсия* в пренебрежении запаздыванием). В качестве волновой функции начального состояния электрона использовать Ψ -функцию K -электрона водородоподобного атома. Скорость вылетающего электрона считать много большей атомной.

11.69. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае, когда начальное и конечное состояния ядра имеют равный нулю момент и одинаковую четность (такие процессы называют конверсией при *монопольном*, или $E0$ -переходе).

11.70. Найти вероятность выбрасывания K -электрона в результате *эффекта Оже* в мезоатоме (при этом находящийся в возбужденном состоянии μ^- -мюон переходит на более низкий уровень, передавая энергию электрону). Ограничиться рассмотрением дипольного, или так называемого P -перехода Оже, при котором изменение орбитального момента мюона $|\Delta l| = 1$. При проведении расчетов считать размеры мюонной орбиты много меньшими электронных и электрон в конечном состоянии — свободным. Рассмотреть, в частности, мюонный переход $2p \rightarrow 1s$.

11.71. То же, что и в предыдущей задаче, но для $\Delta l = 0$ (S -переходы Оже). Ограничиться случаем, когда орбитальный момент мюона в начальном и ко-

нечном состоянии равен нулю. Рассмотреть, в частности, мюонный переход $2s \rightarrow 1s$.

11.72. Произвести классификацию (т. е. указать возможные значения квантовых чисел: суммарного электронного спина S , полного орбитального момента L и четности I) нижних автоионизационных состояний¹⁷⁾ (АИС) двухэлектронного атома или иона, связанных с электронной конфигурацией $nlnl'$ при $n = 2$. Рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение, найти в первом порядке теории возмущений энергетические уровни этих состояний. Указать правильные волновые функции нулевого приближения.

Обсудить вопрос о зависимости ширины уровней АИС от заряда ядра Z .

11.73. Найти зависимость от времени вектора поляризации μ^+ -мюона в основном состоянии мюония, находящегося в однородном магнитном поле, перпендикулярном начальной поляризации мюона (т. е. исследовать прецессию спина мюона). Ограничиться случаем слабого магнитного поля, когда $\mu_B^{(e)} \mathcal{H} \ll \Delta$, где $\mu_B^{(e)}$ — электронный магнетон Бора, Δ — сверхтонкое расщепление основного уровня мюония (сравнить с 11.2). Считать, что при образовании мюония электрон является неполяризованным, а мюон, наоборот, полностью поляризован¹⁸⁾.

11.74. Оценить скорость протекания реакции ядерного синтеза $dt \rightarrow n\alpha$ в мезомолекулярном $dt\mu^-$ ионе

¹⁷⁾ Автоионизационными называют неустойчивые относительно ионизации (вылета электрона) состояния атомных систем с двумя или более возбужденными электронами: при передаче возбуждения одному электрону последний вылетает из атома (иона). АИС являются квазистационарными состояниями и обычно проявляются как резонансы.

¹⁸⁾ Мюоний — своеобразный атом водорода, «ядром» которого является μ^+ -мюон. Изменением поляризаций мюона и электрона в процессе образования мюония можно пренебречь. Напомним основные характеристики мюона: спин $1/2$, масса $m_\mu \approx 207m_e$, магнитный момент равен $e\hbar/2m_\mu c$, время жизни $\tau_\mu \approx 2,2 \cdot 10^{-6}$ с. Так как поляризацию мюона можно достаточно просто измерить по угловому распределению позитронов, возникающих при его распаде $\mu^+ \rightarrow e^+ \nu \bar{\nu}$, то динамика спина мюона может быть использована для исследования свойств вещества, см. обзор И. И. Гуревича и Б. А. Никольского // УФН. — 1976. — Т. 119. — С. 169.

в состоянии с вращательным квантовым числом $K = 0$. Как ее величина сказывается на числе актов реакции, инициируемых одним мюоном, сравнить с 11.59?

Указание. Воспользоваться адиабатическим приближением и формулой теории возмущений по длине рассеяния, см. 11.4. Длина рассеяния в s -состоянии для dt -системы $a_s \approx -(90 + i \cdot 30)$ Фм (см. комментарий в решении задачи). Оценку величины $|\Psi^{(0)}(0)|^2$ связать с проницаемостью кулоновского барьера, разделяющего ядра в мезомолекулярном ионе.

Г л а в а 12

АТОМНОЕ ЯДРО

Ядерные силы, действующие между нуклонами — протонами и нейтронами, — из которых состоят атомные ядра, характеризуются малым радиусом и большой интенсивностью. Качественные закономерности низкоэнергетического нуклон-нуклонного взаимодействия можно описать, только предположив, что радиус сил составляет $R \approx 2 \cdot 10^{-13}$ см, а характерная величина потенциала¹⁾ ядерных сил $U_0 \approx 40$ МэВ. При этом в протон-нейтронной системе имеется, единственное в двухнуклонной системе вообще, связанное состояние — дейтрон, с энергией связи $\epsilon_0 = 2,23$ МэВ; квантовые числа дейтрона $J^P = 1^+$.

Близость свойств протона и нейтрона: одинаковое значение спина, $s = 1/2$, и малое различие масс $m_p = 1836,1 m_e$, $m_n = 1838,6 m_e$, является отражением *изотопической симметрии*, проявляющейся в свойствах и взаимодействиях ядерно активных (или, как говорят, *сильновзаимодействующих*) элементарных частиц — *адронов*. Согласно этой симметрии адроны группируются в изотопические мультиплеты²⁾, характеризующиеся определенным значением T изотопического спина. Изоспин можно рассматривать как векторную величину в некотором абстрактном трех-

¹⁾ Для сравнения укажем, что потенциал кулоновского взаимодействия на таком расстоянии составляет $U_{\text{кул}} = e^2/R \approx 0,7$ МэВ, а взаимодействие магнитных моментов нуклонов — еще меньше: $U_{\text{магн}} \sim \mu^2/R^3 \sim 10^{-2}$ МэВ, где $\mu = e\hbar/m_p c$.

²⁾ В дополнение к изодублету нуклонов (p, n) отметим изотриплет пионов (π^+, π^0, π^-); при этом $T_3(\pi^\pm) = \pm 1$, $T_3(\pi^0) = 0$.

мерном пространстве — пространстве изотопического спина. Формальные свойства изоспина, в том числе и вид соответствующих операторов \hat{T} , аналогичны свойствам момента (спина) в обычном пространстве. Возможные значения T при этом связаны с собственными значениями $T(T+1)$ оператора \hat{T}^2 и равны $0, 1/2, 1, \dots$. Частицы, принадлежащие данному изомультиплету, различаются значением электрического заряда и отвечают различным значениям компоненты T_3 изоспина³⁾; число частиц в изомультиплете равно $(2T+1)$. Все они имеют одинаковые спин и внутреннюю четность, близкие массы и обладают сходным сильным взаимодействием. Подобную близость свойств имеют и системы, состоящие из частиц, принадлежащих одним и тем же изомультиплетам⁴⁾, в состояниях, различающихся лишь значением компоненты T_3 суммарного изоспина системы (но одинаковыми другими квантовыми числами, включая и значение T).

Изотопический спин нуклона $T_N \equiv \tau = 1/2$. Операторы компонент изоспина нуклона $\hat{\tau}$ имеют вид (сравнить с матрицами Паули для спина $s = 1/2$)

$$\hat{\tau}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{XII. 1})$$

Физические состояния нуклона — протон и нейтрон — описываются собственными функциями оператора $\hat{\tau}_3$, так что⁵⁾

$$\Psi_p \equiv \Psi_{\tau_3 = +1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_n \equiv \Psi_{\tau_3 = -1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{XII. 2})$$

при этом собственные значения $\tau_3 = \pm 1/2$ определяют заряд частицы $q = e(1 + 2\tau_3)/2$.

3) Физическая выделенность «оси квантования» в изопространстве связана с нарушением изотопической симметрии, причем, в основном, за счет электромагнитного взаимодействия; оно же ответственно за сравнительно небольшое расщепление масс в изомультиплете.

4) Например, системы pp, pn, nn или различные зарядовые состояния лN-системы.

5) В литературе используется также и «обращенная» классификация, при которой $\tau_3 = +1/2$ соответствует нейтрону, а $\tau_3 = -1/2$ — протону; под $\hat{\tau}$ часто подразумеваются матрицы, удвоенные по отношению к (XII.1) (так что $\hat{\tau}_i \equiv \hat{\sigma}_i$).

Классификация состояний и ряд свойств атомных ядер могут быть получены на основе модели оболочек. В этой модели каждый нуклон рассматривается как движущийся в некотором среднем (самосогласованном) поле, создаваемом остальными нуклонами ядра. При этом для описания последовательности E_{n_r, l_j} одночастичных нуклонных уровней, согласующейся с экспериментальными данными, наряду с (доминирующим) сферически симметричным самосогласованным потенциалом $U(r)$ необходимо также ввести спин-орбитальное взаимодействие вида $\hat{U}_{ls} = -f(r)\hat{l}\hat{s}$.

В модели оболочек спин и четность J^P , магнитный μ и квадрупольный Q моменты ядра определяются лишь нуклонами сверх заполненных оболочек. В частности, в случае ядра с одним таким нуклоном на оболочке nl_j оно имеет спин $J = j = l \pm 1/2$ и четность $P = (-1)^l$. При этом оператор магнитного момента ядра принимает вид $\hat{\mu} = g_l \hat{l} + g_s \hat{s}$, где g_l и g_s — орбитальный и спиновый гиромангнитные множители, равные: $g_l = 1$, $g_s = 5,59$ для протона и $g_l = 0$, $g_s = -3,83$ для нейтрона (μ и g выражены в единицах ядерного магнетона, равного $e\hbar/2m_p c$). Усреднение этого оператора с использованием результата 3.40 дает магнитный момент нуклона на оболочке nl_j и соответствующего ядра:

$$\mu_j \equiv g_j j = \langle j, l, j_z = j | \hat{\mu}_z | j, l, j_z = j \rangle = \\ = \{(g_l + g_s)j(j+1) + (g_l - g_s)[l(l+1) - 3/4]\} / 2(j+1); \quad (\text{XII. 3})$$

значения μ_j и g_j для ряда состояний даны в таблице

		$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$	
Протон	μ	2,79	-0,26	3,79	0,12	4,79	(XII. 4)
	g	5,59	-0,53	2,53	0,08	1,92	
Нейтрон	μ	-1,91	0,64	-1,91	1,15	-1,91	
	g	-3,83	1,28	-1,27	0,77	-0,76	

Приведенные результаты модели оболочек для ядер, имеющих лишь один нуклон сверх заполненных оболочек, непосредственно переносятся и на случай ядер с одной (протонной или нейтронной) дыркой, причем μ и g для дырочного состояния такие же, как для соответствующего нуклона. Для других ядер (например, с незаполненными оболочками как по протонам, так и по нейтронам) предсказания модели оболочек с одночастичным нуклонным потенциалом уже не являются однозначными. Свойства таких ядер существенно зависят от *остаточного взаимодействия* нуклонов незаполненных оболочек друг с другом. Как показывает анализ экспериментальных данных, такое взаимодействие для нуклонов одного и того же зарядового состояния носит характер попарного «спаривания» в состоянии с суммарным моментом, равным нулю. Поэтому при четном числе протонов и (или) нейтронов их суммарный момент в основном состоянии ядра равен нулю; при этом спин и четность ядра с нечетным числом нуклонов полностью определяются квантовыми числами *неспаренного* нуклона.

Характерный размер ядра, состоящего из A нуклонов, составляет $R \approx r_0 A^{1/3}$, где $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13}$ см.

§ 1. Основные представления о ядерных силах. Дейтрон

12.1. Аппроксимируя потенциал взаимодействия протона с нейтроном сферической прямоугольной потенциальной ямой радиуса ⁶⁾ $R = 1,7 \cdot 10^{-13}$ см, оценить глубину ямы, используя значение $\epsilon_0 = 2,23$ МэВ энергии связи дейтрона и найти для него вероятность нахождения нуклонов вне ямы, а также $\langle r \rangle$ — среднее расстояние между нуклонами.

12.2. Каким был бы магнитный момент системы, состоящей из протона и нейтрона, если бы она находилась в состоянии

- а) 1S_0 ; б) 3S_1 ; в) 1P_1 ; г) 3P_0 ; д) 3P_1 ; е) 3D_1 ?

Воспользоваться значениями магнитных моментов

⁶⁾ Для прямоугольной ямы *эффективный радиус взаимодействия* r_0 совпадает с ее радиусом R , см. 13.43. Значение R выбрано так, что r_0 совпадает с экспериментальным значением. В связи с задачей о дейтроне — системе с малой энергией связи — см. также 11.36.

свободных нуклонов: $\mu_p = 2,79$ и $\mu_n = -1,91$ (в ядерных магнетонах). Имея в виду, что спин дейтрона $J_d = 1$, его магнитный момент $\mu_d = 0,86$ и он представляет суперпозицию 3S_1 - и 3D_1 -волн, оценить примесь D -волны (сравнить с 12.3).

12.3. Магнитный момент дейтрона, описываемого суперпозицией (${}^3S_1 + {}^3D_1$)-волн, равен

$$\mu_d = (1 - \omega) \mu({}^3S_1) + \omega \mu({}^3D_1) \approx 0,86 \text{ яд. маг.},$$

где $\mu({}^3S_1)$ и $\mu({}^3D_1)$ — магнитные моменты протон-нейтронной системы в состояниях 3S_1 , 3D_1 , $\omega \approx 0,04$ — примесь D -волны (см. предыдущую задачу).

Объяснить, почему для квадрупольного момента дейтрона нет соотношения, аналогичного приведенному выше для магнитного момента. В связи с этим отметим, что квадрупольный момент 3S_1 -состояния равен нулю, в состоянии 3D_1 он отрицателен, а его экспериментальное значение для дейтрона $Q_d \approx \approx 2,82 \cdot 10^{-27} \text{ см}^2 > 0$.

12.4. Какие свойства дейтрона указывают на зависимость протон-нейтронного взаимодействия от спинов нуклонов?

Рассмотрев зависящие от спина потенциалы:

$$a) \hat{U}_S = V(r) \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 = V(r) (2\hat{S}^2 - 3);$$

$$б) \hat{U} = V(r) \hat{S} \hat{L} \text{ (спин-орбитальное взаимодействие);}$$

$$в) \hat{U} = V(r) [6(\hat{S}n)^2 - 2\hat{S}^2] \text{ (тензорные силы) } (n =$$

$= r/r, \quad r = r_1 - r_2, \quad S = 1/2 (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)$ — оператор суммарного спина нуклонов), выяснить, какие из них совместно с центральным потенциалом могут быть использованы для объяснения обсуждавшихся выше свойств дейтрона. Указать интегралы движения для рассматриваемых потенциалов.

12.5. Показать, что волновая функция дейтрона, представляющая суперпозицию ${}^3S_1 + {}^3D_1$ -волн, может быть записана в виде

$$\Psi_d = \Psi({}^3S_1) + \Psi({}^3D_1) = [f_0(r) + f_2(r) \hat{S}_{12}] \chi_{S=1}.$$

Здесь $\hat{S}_{12} = 6(\hat{S}n)^2 - 2\hat{S}^2$, $\hat{S} = 1/2 (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)$ — оператор суммарного спина нуклонов, $\chi_{S=1}$ — произвольная спиновая функция для спина $^7) S = 1$.

⁷⁾ Об использовании различных представлений для спина $S = 1$ см. 5.26.

Считая, что потенциал взаимодействия протона с нейтроном имеет вид $\hat{U} = U_S(r) + U_T(r)\hat{S}_{12}$ (суперпозиция центрального и тензорного взаимодействий, сравнить с предыдущей задачей), получить систему уравнений для радиальных функций $f_{0,2}(r)$ дейтрона.

Показать также, что потенциал тензорных сил, рассматриваемый как возмущение центрального потенциала, приводит к сдвигу 3S -уровня лишь во втором порядке теории возмущений.

12.6. Для системы из двух нуклонов:

1) найти собственные функции и собственные значения изотопического спина (его величины T и проекции T_3);

2) указать значение изоспина T в состоянии ^{2S+1}L с определенными значениями суммарного спина S и момента L относительного движения нуклонов (сравнить с 10.9);

3) указать изоспиновую часть волновой функции дейтрона.

12.7. От каких свойств инвариантности реальных ядерных сил пришлось бы отказаться, если бы состояние дейтрона представляло суперпозицию $^1P_1 + ^3P_1$ (а не $^3S_1 + ^3D_1$, как у реального дейтрона)? Указать возможный вид взаимодействия, которое могло бы привести к такому состоянию.

12.8. Предположив, что взаимодействие двух нуклонов имеет следующую изотопическую структуру:

$\hat{U} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 \hat{\tau}_3^{(1)} \hat{\tau}_3^{(2)}$, где $\hat{V}_{1,2}$ — операторы, уже не зависящие от изоспиновых переменных (они — операторы в пространстве координат и спинов, симметричные по отношению к перестановке нуклонов), найти вид взаимодействия в системе из а) двух протонов, б) двух нейтронов, в) протона и нейтрона.

Согласуется ли рассматриваемое взаимодействие с 1) изотопической инвариантностью; 2) зарядовой симметрией ядерных сил?

12.9. Для системы из двух нуклонов:

1) указать наиболее общий вид изотопически инвариантного оператора взаимодействия \hat{O} и выразить его через операторы \hat{O}_T нуклон-нуклонного взаимодействия в состояниях с определенным значением изотопического спина $T = 0$ и 1;

2) указать изотопическую структуру оператора кулоновского взаимодействия нуклонов.

12.10. Найти среднее значение энергии кулоновского взаимодействия протонов в ядре ${}^3\text{He}$ и оценить размеры зеркальных ядер трития ${}^3\text{H}$ и гелия ${}^3\text{He}$ исходя из того, что в β -распаде ${}^3\text{H} \rightarrow {}^3\text{He} + e^- + \bar{\nu}$ максимальная кинетическая энергия электрона $\epsilon_0 = 17$ кэВ.

Указание. У рассматриваемых ядер нет возбужденных состояний. Напомним, что $(m_n - m_p)c^2 \approx 2,5m_e c^2 \approx 1,3$ МэВ.

12.11. Как известно, размеры ядер определяются соотношением $R = r_0 A^{1/3}$, где A — число нуклонов в ядре.

Оценить значение r_0 из данных о β^+ -распаде ядра, содержащего $(Z + 1)$ протонов и Z нейтронов, так что $A = 2Z + 1$, выразив его через максимальное значение энергии ϵ_0 позитронов распада. Считать, что распадающееся ядро и ядро — продукт распада, являющиеся зеркальными ядрами, находятся в одинаковых состояниях (т. е. имеют одинаковые квантовые числа, за исключением значений T_3 -компонент изоспина). Энергию кулоновского взаимодействия протонов в ядре считать равной электростатической энергии равномерно заряженного шара, имеющего такие же заряд и радиус, как и ядро.

Получить числовую оценку r_0 из распада ${}^{27}_{14}\text{Si} \rightarrow {}^{27}_{13}\text{Al} + e^+ + \nu$, для которого $\epsilon_0 = 3,48$ МэВ.

§ 2. Модель оболочек

12.12. Считая, что самосогласованное поле, действующее на нуклон в ядре, можно аппроксимировать потенциалом $U(r) = -U_0 + m\omega^2 r^2/2$ (m — масса нуклона), найти одночастичные энергетические уровни.

К каким значениям *магических* чисел приводит такая модель самосогласованного потенциала?

Каковы предсказания модели в отношении моментов и четностей основных состояний ядер?

Оценить значение параметра $\hbar\omega$ модели, основываясь на данных о размерах ядер.

12.13. В условиях предыдущей задачи обсудить изменения энергетического спектра однонуклонных состояний, возникающие при введении спин-орбитального взаимодействия вида $\hat{U}_{ls} = -\alpha \hat{l} \hat{s}$. Для $\alpha =$

$= \hbar\omega/10$ нарисовать картину нижних одночастичных уровней⁸⁾.

В рамках рассматриваемой модели найти моменты (спины) и четности основных состояний следующих ядер: ${}^6_2\text{He}$, ${}^6_3\text{Li}$, ${}^{10}_5\text{B}$, ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{13}_6\text{C}$, ${}^{13}_7\text{N}$, ${}^{14}_6\text{C}$, ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{17}_8\text{O}$, ${}^{27}_{13}\text{Al}$, ${}^{40}_{20}\text{Ca}$.

12.14. В рамках модели оболочек указать спин-изоспиновую зависимость волновых функций основных состояний ядер трития ${}^3_1\text{H}$ и гелия ${}^3_2\text{He}$.

12.15. Указать возможные значения полного момента J и изотопического спина T ядер, содержащих сверх заполненных оболочек два нуклона в состоянии $p_{1/2}$ с одинаковым n . Ядрами, имеющими такую конфигурацию, являются ${}^{14}_6\text{C}$, ${}^{14}_7\text{N}$, ${}^{14}_8\text{O}$ (два нуклона сверх заполненных оболочек $(1s_{1/2})^4 (1p_{3/2})^8$).

12.16. То же, что и в предыдущей задаче, для двух нуклонов в состоянии $p_{3/2}$.

12.17. В модели оболочек найти спины и магнитные моменты основных состояний следующих ядер⁹⁾

$$\begin{aligned} &{}^3_1\text{H} (J = 1/2, \mu = 2,91); \quad {}^3_2\text{He} (1/2; -2,13); \\ &{}^{11}_5\text{B} (3/2; 2,69); \quad {}^{13}_6\text{C} (1/2; 0,70); \quad {}^{15}_7\text{N} (1/2; -0,28); \\ &{}^{17}_8\text{O} (5/2; -1,89); \quad {}^{29}_{14}\text{Si} (1/2; -0,55). \end{aligned}$$

При решении задачи воспользоваться схемой одночастичных уровней из 12.13.

12.18. В модели оболочек найти магнитный момент ядра, содержащего сверх заполненных оболочек по одному протону и нейтрону (или имеющего соответствующую дырку) в одинаковых состояниях nlj , в зависимости от спина ядра J .

Сравнить полученный результат с экспериментальными данными для следующих ядер:

$$\begin{aligned} &{}^2_1\text{H} (J = 1; \mu = 0,86); \quad {}^6_3\text{Li} (1; 0,82); \\ &{}^{10}_5\text{B} (3; 1,80); \quad {}^{14}_7\text{N} (1; 0,40); \end{aligned}$$

воспользоваться схемой однонуклонных уровней из 12.13.

⁸⁾ Параметр $\alpha > 0$, так как согласно экспериментальным данным уровень с $j = l + 1/2$ лежит ниже уровня с $j = l - 1/2$.

⁹⁾ В скобках указаны экспериментальные значения спина J и магнитного момента μ ядра. Заметим, что рассматриваемые ядра содержат сверх заполненных оболочек лишь один нуклон (или имеют одну дырку в незаполненной оболочке).

12.19. Рассчитать магнитный момент ядра, содержащего сверх заполненных оболочек по одному протону и нейтрону (или имеющего соответствующие дырки) в одинаковых состояниях в условиях LS -связи¹⁰).

Применить полученный результат к основному состоянию ядра ${}^6_3\text{Li}$, имеющему спин $J = 1$. Считая, что нуклоны сверх заполненной оболочки $(1s)^4$ находятся в $1p$ -состоянии, найти магнитный момент ядра для различных возможных значений L и S и сравнить с экспериментальным значением $\mu_{\text{эксп}} = 0,82$, а также с результатом предыдущей задачи. Каков изотопический спин рассматриваемых состояний?

12.20. Найти в схеме jj -связи магнитный момент ядра, имеющего одинаковое число протонов и нейтронов сверх заполненных оболочек в одинаковых состояниях nlj в зависимости от спина ядра J .

Применить полученный результат к ядру ${}^{22}_{11}\text{Na}$, имеющему спин $J = 3$ и магнитный момент $\mu_{\text{эксп}} = 1,75$.

12.21. То же, что и в предыдущей задаче, но в условиях LS -связи; сравнить с 12.19.

12.22. В рамках модели оболочек найти соотношение между магнитными моментами основных состояний зеркальных ядер. Считать, что все нуклоны (обоих зарядовых состояний) сверх заполненных оболочек находятся в одинаковых состояниях nlj .

12.23. Найти квадрупольный момент Q_0 ядер, имеющих сверх заполненных оболочек лишь один протон в состоянии: а) $s_{1/2}$; б) $p_{3/2}$; в) $d_{5/2}$ (выразить Q_0 через $\langle r_p^2 \rangle$). Считать $A \gg 1$.

12.24. Обобщить результат предыдущей задачи на случай ядер с протоном в состоянии с произвольным значением l и $j = l + 1/2$.

12.25. Найти квадрупольный момент ядра, имеющего сверх заполненных оболочек лишь один протон в состоянии с произвольным орбитальным моментом l и $j = l - 1/2$.

Сравнить с результатами предыдущих двух задач.

12.26. Найти квадрупольный момент ядра, имеющего сверх заполненных оболочек лишь один нейтрон

¹⁰) При этом одночастичные уровни характеризуются квантовыми числами n, l , а не n, l, j , как в схеме jj -связи.

в состоянии с орбитальным моментом l и полным моментом $j = l \pm 1/2$.

Указание. Ядро рассматривать как систему, состоящую из двух подсистем: нейтрона сверх заполненных оболочек и нуклонов заполненных оболочек (как целого), движущихся относительно центра масс ядра.

12.27. В модели оболочек с самосогласованным однонуклонным потенциалом осцилляторного вида, см. 12.12, получить на основе квазиклассических соображений выражение для радиальной плотности ядер с $A \gg 1$. При решении задачи пренебречь кулоновским взаимодействием протонов и рассматривать ядра с одинаковым числом протонов и нейтронов. Согласуется ли полученный результат с экспериментальными данными для тяжелых ядер?

12.28. То же, что и в предыдущей задаче, для самосогласованного потенциала вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ \infty, & r > R. \end{cases}$$

Выбрав в соответствии с экспериментальными данными параметр R модели равным радиусу ядра $R = r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13}$ см, найти граничный импульс нуклонов в ядре и максимальную их скорость.

§ 3. Изотопическая инвариантность

12.29. Заряды (в единицах заряда протона e) различных частиц, входящих в один и тот же изотопический мультиплет, в общем случае следующим образом выражаются через значение компоненты изоспина T_3 , соответствующее данной частице: $q = \frac{1}{2}Y + T_3$, где Y — так называемый *гиперзаряд* (так, для нуклона $Y_N = 1$, для пиона $Y_\pi = 0$ и т. д.).

Показать, что сохранение изотопического спина во взаимодействиях частиц влечет за собой и сохранение гиперзаряда.

12.30. Найти наиболее общий вид изотопически инвариантного оператора взаимодействия пиона с нуклоном. Как операторы πN -взаимодействия в состояниях с определенным значением изоспина \hat{U} ($T = 1/2, 3/2$) связаны с найденным оператором \hat{U} ?

Выразить \hat{U} через операторы $\hat{U}(T)$.

12.31. То же, что и в предыдущей задаче, для системы из двух пионов. Выразить оператор \hat{U} через операторы лл-взаимодействия в состояниях с определенным значением изоспина.

12.32. Для двухпионной системы указать изотопическую структуру оператора кулоновского взаимодействия пионов.

12.33. То же, что и в предыдущей задаче, для кулоновского взаимодействия в πN -системе.

12.34. Каковы возможные значения изотопического спина двухпионной системы в состояниях с определенным значением L орбитального момента относительного движения?

12.35. Для системы, состоящей из двух π^0 -мезонов, найти вероятности $\omega(T)$ различных значений суммарного изотопического спина системы и среднее значение \bar{T}^2 .

12.36. Найти вероятности различных значений суммарного изотопического спина пион-нуклонной системы и среднее значение \bar{T}^2 в следующих зарядовых состояниях: $\pi^+\pi$, $\pi^+\pi$, $\pi^0\pi$, $\pi^0\pi$, $\pi^-\pi$, $\pi^-\pi$.

12.37. Нейтральная частица f^0 с изотопическим спином $T=0$ распадается на два пиона: $f^0 \rightarrow 2\pi$. Возможные каналы распада: $f^0 \rightarrow \pi^+\pi^-$ и $f^0 \rightarrow 2\pi^0$. Найти соотношение между вероятностями распада по этим каналам.

12.38. Показать, что изоспиновая часть волновой функции системы из трех пионов в состоянии с суммарным изотопическим спином системы $T(3\pi)=0$ имеет определенную симметрию по отношению к перестановке изоспиновых переменных любых двух пионов, и выяснить характер этой симметрии.

На основании полученного результата показать, что нейтральная частица ω^0 с изотопическим спином $T=0$ не может распадаться на три π^0 -мезона, т. е. распад $\omega^0 \rightarrow 3\pi^0$ запрещен.

12.39. Частица Δ , имеющая изотопический спин $T=3/2$ и зарядовые состояния Δ^{++} , Δ^+ , Δ^0 , Δ^- , отвечающие соответственно значениям $+3/2$, $+1/2$, $-1/2$, $-3/2$ проекции T_3 изоспина, распадается на пион и нуклон: $\Delta \rightarrow \pi N$.

Указать возможные каналы распада для различных зарядовых состояний частицы Δ и найти соотношения между вероятностями распада по этим каналам.

12.40. То же, что и в предыдущей задаче, для частицы N^* , имеющей изоспин $T = 1/2$, зарядовые состояния N^{*+} ($T_3 = 1/2$), N^{*0} ($T_3 = -1/2$) и распадающейся на пион и нуклон: $N^* \rightarrow \pi N$.

12.41. Показать, что

$$\frac{d\sigma(p + p \rightarrow d + \pi^+)}{d\sigma(n + p \rightarrow d + \pi^0)} = 2,$$

где $d\sigma$ — дифференциальные сечения соответствующих реакций, взятые при одних и тех же относительных энергиях, углах разлета и взаимных ориентациях спинов.

12.42. Показать, что

$$\frac{d\sigma(p + d \rightarrow d + n + \pi^+)}{d\sigma(p + d \rightarrow d + p + \pi^0)} = 2,$$

где смысл $d\sigma$ такой же, что и в предыдущей задаче.

12.43. Предполагая, что рассеяние пионов нуклонами (в некотором энергетическом интервале) происходит главным образом через промежуточное состояние πN -системы с полным изотопическим спином $T = 3/2$ (так что при этом взаимодействие в состоянии с $T = 1/2$ пренебрежимо мало), найти при одинаковых относительных энергиях, углах разлета и ориентациях спинов соотношения между дифференциальными сечениями следующих трех реакций:

$$\begin{aligned} \pi^+ + p &\rightarrow \pi^+ + p \quad (\text{I}), & \pi^- + p &\rightarrow \pi^0 + n \quad (\text{II}), \\ & & \pi^- + p &\rightarrow \pi^- + p \quad (\text{III}). \end{aligned}$$

12.44. Основываясь на зарядовой симметрии нуклон-нуклонных и пион-нуклонных взаимодействий, найти соотношение между дифференциальными сечениями процессов

$$p + p \rightarrow p + p + \pi^-, \quad n + p \rightarrow n + p + \pi^+.$$

Глава 13

СТОЛКНОВЕНИЯ ЧАСТИЦ

Исследование рассеяния частиц с импульсом $\mathbf{p}_0 = \hbar \mathbf{k}_0$ потенциалом $U(\mathbf{r})$ связано с решением уравнения Шрёдингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] \Psi_{\mathbf{k}_0}^+(\mathbf{r}) = E \Psi_{\mathbf{k}_0}^+(\mathbf{r}), \quad (\text{XIII. 1})$$

имеющим следующую асимптотику на больших расстояниях¹⁾:

$$\Psi_{k_0}^+(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} e^{ik_0 r} + \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)}{r} e^{ikr}, \quad \mathbf{k} = k_0 \mathbf{r}/r, \quad (\text{XIII. 2})$$

\mathbf{k} — волновой вектор рассеянной частицы ($k = k_0 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$). При этом амплитуда рассеяния $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)$ определяет дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)|^2$.

Воспользовавшись функцией Грина свободной частицы

$$G_E^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{m}{2\pi\hbar^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (\text{XIII. 3})$$

уравнение (XIII.1) вместе с граничным условием (XIII.2) можно записать в виде интегрального уравнения

$$\Psi_{k_0}^+(\mathbf{r}) = e^{ik_0 r} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \Psi_{k_0}^+(\mathbf{r}') dV'. \quad (\text{XIII. 4})$$

Отсюда, в частности, следует выражение для амплитуды рассеяния непосредственно через волновую функцию в области действия потенциала

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ikr} U(\mathbf{r}) \Psi_{k_0}^+(\mathbf{r}) dV, \quad (\text{XIII. 5})$$

удобное для различных приближенных вычислений.

Так, при $\Psi_{k_0}^+ = e^{ik_0 r}$ из (XIII.5) следует приближение Борна для амплитуды рассеяния

$$f^B = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{q}), \quad \tilde{U}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV. \quad (\text{XIII. 6})$$

Здесь $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ определяет изменение импульса частицы $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_0$ при рассеянии, при этом $q = 2k \sin(\theta/2)$, а θ — угол рассеяния. Это выражение представляет первый член разложения амплитуды по степеням потенциала (кратности) взаимодействия. Условием его применимости является выполнение

¹⁾ При этом предполагается, что потенциал убывает быстрее, чем ∞/r ; в противном случае как падающая, так и рассеянная волны искажаются на больших расстояниях (сравнить с рассеянием на кулоновском потенциале).

хотя бы одного из неравенств:

$$U_0 \ll \hbar^2/mR^2 \quad \text{или} \quad U_0 \ll \hbar v/R, \quad (\text{XIII. 7})$$

где U_0 и R — характерная величина потенциала и его радиус.

При рассеянии в центральном потенциале амплитуда рассеяния зависит лишь от энергии E и полярного угла θ (нет азимутальной асимметрии), а в борновском приближении — лишь от величины $\hbar q$ передаваемого импульса. При этом (XIII. 6) можно преобразовать к виду

$$f^B(q) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) \frac{\sin qr}{q} r dr. \quad (\text{XIII. 8})$$

В случае центрального потенциала для амплитуды рассеяния справедливо разложение по *парциальным волнам*

$$f(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \varphi_l(E) P_l(\cos \theta), \quad (\text{XIII. 9})$$

$$\varphi_l = (e^{2i\delta_l} - 1)/2ik = 1/k (\text{ctg } \delta_l - i),$$

где *фазовые сдвиги* $\delta_l(k)$ связаны с асимптотикой на больших расстояниях радиальной волновой функции $rR_{kl} \approx C \sin(kr - \pi l/2 + \delta_l)$, отвечающей моменту l частицы. При этом полное сечение рассеяния

$$\begin{aligned} \sigma &= \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \\ &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) (\text{ctg}^2 \delta_l + 1)^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{XIII. 10})$$

Из сопоставления (XIII. 10) и (XIII. 9) следует соотношение — *оптическая теорема*²⁾:

$$\text{Im } f(E, \theta = 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma(E). \quad (\text{XIII. 11})$$

²⁾ Это соотношение носит общий характер. Оно справедливо и для рассеяния составных частиц, когда возможны неупругие процессы. При этом под $\sigma(E)$ следует понимать полное сечение столкновения, а под $f(E, 0)$ амплитуду упругого рассеяния на угол $\theta = 0$ (без изменения внутренних состояний сталкивающихся частиц).

Приведем приближенные формулы для фазовых сдвигов. В борновском приближении (при этом $|\delta_l^B| \ll 1$)

$$\delta_l^B(k) = -\frac{\pi m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) J_{l+1/2}^2(kr) r dr. \quad (\text{XIII. 12})$$

В квазиклассическом приближении (r_0 — точка поворота)

$$\delta_l = \int_{r_0}^\infty \left\{ \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}} - k \right\} dr + \\ + 1/2\pi(l+1/2) - kr_0, \quad (\text{XIII. 13})$$

причем в случае $|U(r)| \ll E$ это выражение упрощается:

$$\delta_l = - \int_{r_0}^\infty \frac{mU(r) dr}{\hbar^2 \sqrt{k^2 - (l+1/2)^2/r^2}}, \quad r_0 = (l+1/2)/k. \quad (\text{XIII. 14})$$

При рассеянии медленных частиц, $kR \ll 1$, в случае достаточно быстрого убывания потенциала (см. 13.28—30) справедливо разложение эффективного радиуса

$$k^{2l+1} \text{ctg } \delta_l = -1/a_l + r_l k^2/2 + \dots, \quad (\text{XIII. 15})$$

где a_l и r_l называют длиной рассеяния³⁾ и эффективным радиусом взаимодействия в состоянии с орбитальным моментом l ; эти параметры согласно (XIII. 9, 10) определяют низкоэнергетическое рассеяние в соответствующей парциальной волне.

Если в потенциале нет мелкого реального или виртуального (при $l=0$) и квазистационарного (при $l \neq 0$) уровня, то член с эффективным радиусом выступает как поправка. В этом случае $\delta_l \approx -a_l k^{2l+1}$, $|a_l| \leq R^{2l+1}$ и $\sigma_l \leq 4\pi(2l+1)(kR)^{4l} R^2$, так что доми-

³⁾ Подчеркнем, что эти параметры имеют размерность длины лишь для $l=0$. В общем случае их размерность: $[a_l] = L^{2l+1}$, $[r_l] = L^{1-2l}$, где L — размерность длины.

нирующий вклад в сечение вносит рассеяние в s -состоянии.

При наличии в потенциале мелкого уровня с энергией $|E_l| \ll \hbar^2/mR^2$ и моментом l рассеяние в соответствующей парциальной волне имеет резкую энергетическую зависимость, а величина $\sigma_l(E)$ значительно превышает нерезонансное значение. В случае существования мелкого s -уровня имеем $|a_0| \gg R$ и

$$\sigma(E) \approx \sigma_{l=0}(E) \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1+r_0\kappa_0}{E+\varepsilon_0}, \quad (\text{XIII. 16})$$

где $|E_0| = \varepsilon_0 = \hbar^2\kappa_0^2/2m$, а κ_0 определяется соотношением⁴⁾ $\kappa_0 = 1/a_0 + r_0\kappa_0^2/2$. При $a_0 > 0$ также $\kappa_0 > 0$, и ε_0 определяет энергию связи реального уровня дискретного спектра; при $a_0 < 0$ уровень — виртуальный.

Для резонансного рассеяния с моментом $l \neq 0$ характер энергетической зависимости и величина $\sigma_l(E)$ существенно зависят от природы уровня (реальный он или квазистационарный). При $a_l < 0$ уровень квазистационарный. Записав $E_l = E_R - i\Gamma_R/2$, где E_R и Γ_R — положение уровня и его ширина, из уравнения $\text{ctg } \delta_l(E_l) = i$ находим⁵⁾

$$E_R \equiv \hbar^2 k_R^2/2m \approx \hbar^2/ma_l r_l \quad \text{и} \quad \Gamma_R \approx (2\hbar^2/m |r_l|) k_R^{2l+1}.$$

В этом случае сечение имеет резкую энергетическую зависимость в области энергий, близких к E_R , в которой

$$\sigma_l(E) \approx \frac{(2l+1)\pi}{k_R^2} \frac{\Gamma_R^2}{(E-E_R)^2 + \Gamma_R^2/4}. \quad (\text{XIII. 17})$$

При рассеянии быстрых частиц, когда выполнены условия $kR \gg 1$ и $|U(\mathbf{r})| \ll E$, для амплитуды в наиболее существенной области малых углов рассеяния

⁴⁾ С учетом (XIII. 15) оно следует из условия $\text{ctg } \delta_l(E_l) = i$, определяющего положения полюсов парциальной амплитуды, $\kappa \approx -i\sqrt{2mE/\hbar^2}$. В случае $l=0$ имеем, вообще говоря, $r_0 \sim R$ и слагаемое с эффективным радиусом выступает как поправка; при этом $\kappa_0 \approx a_0^{-1}$, $\varepsilon_0 \approx \hbar^2/2ma_0^2$ и $r_0\kappa_0 \ll 1$.

⁵⁾ В условиях существования мелкого уровня с $l \neq 0$ эффективный радиус $r_l < 0$, так что, как и следует, $E_R, \Gamma_R > 0$; см. 13.44.

$\theta \leq (kR)^{-1}$ справедливо выражение

$$f(\mathbf{k}_0, \mathbf{q}_\perp) = \frac{k}{2\pi i} \int [S(\rho) - 1] e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} d^2\rho \quad (\text{XIII. 18})$$

(приближение эйконала). Здесь \mathbf{q}_\perp — составляющая \mathbf{q} в направлении, перпендикулярном импульсу $\hbar\mathbf{k}_0$ падающих частиц (при этом $q_\perp \approx q \approx k\theta$, $q_\parallel \approx k\theta^2/2$), а

$$S(\rho) = e^{2i\delta(\rho)}, \quad \delta(\rho) = -\frac{1}{2\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} U(\rho, z) dz. \quad (\text{XIII. 19})$$

Воспользовавшись оптической теоремой, получаем согласно (XIII. 18) полное сечение рассеяния⁶⁾

$$\sigma(E) = 2 \int (1 - \cos 2\delta(\rho)) d^2\rho. \quad (\text{XIII. 20})$$

В случае центрального потенциала выражение (XIII. 19) для $\delta(\rho)$ совпадает с квазиклассическим (XIII. 14) при $l \approx k\rho \gg 1$, а (XIII. 18) можно записать также в виде

$$f(k, \theta) = ik \int_0^\infty (1 - e^{2i\delta(\rho)}) J_0(k\rho\theta) \rho d\rho. \quad (\text{XIII. 21})$$

При столкновении частиц с отличными от нуля спинами и с зависящим от спина взаимодействием амплитуда рассеяния является уже матрицей \hat{f} — оператором в пространстве спиновых состояний. Ее матричные элементы $\chi_f^* \hat{f} \chi_i$ определяют амплитуду рассеяния из начального спинового состояния, описываемого спиновой функцией χ_i , в конечное состояние, описываемое функцией χ_f . При рассеянии частицы со спином $s = 1/2$ на бесспиновой частице и при сохраняющем четность взаимодействии⁷⁾

$$\hat{f} = A(k, \theta) + iB(k, \theta) \mathbf{v} \hat{\sigma}, \quad \mathbf{v} = [\mathbf{k}_0 \mathbf{k}] / |\mathbf{k}_0 \mathbf{k}|. \quad (\text{XIII. 22})$$

Дифференциальное сечение рассеяния, просуммиро-

⁶⁾ Для справедливости этого соотношения достаточно выполнения лишь одного условия: $kR \gg 1$, см. 13.51.

⁷⁾ Обращаем внимание на выделение перед B множителя i по сравнению с формулой (140.4) из [1].

ванное по различным спиновым состояниям рассеянной частицы

$$d\sigma/d\Omega = |A|^2 + |B|^2 + 2 \operatorname{Im}(AB^*) \mathbf{v} \mathbf{P}_0, \quad (\text{XIII. 23})$$

где $\mathbf{P}_0 = 2\chi_i^* \hat{\mathbf{s}} \chi_i$ — вектор поляризации частиц в начальном (до столкновения) состоянии. Поляризационное состояние рассеянных частиц зависит как от взаимодействия в системе, так и от начальной поляризации \mathbf{P}_0 . Если до столкновения частицы были не поляризованы, $\mathbf{P}_0 = 0$, то после рассеяния вектор поляризации

$$\mathbf{P} = 2 \operatorname{Im}(AB^*) \mathbf{v} / (|A|^2 + |B|^2). \quad (\text{XIII. 24})$$

Приведем также разложение амплитуды (XIII. 22) по парциальным волнам:

$$A = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} [(l+1) (\exp(2i\delta_l^+) - 1) + l (\exp(2i\delta_l^-) - 1) P_l(\cos \theta),$$

$$B = \frac{1}{2ik} \sum_{l=1}^{\infty} (\exp(2i\delta_l^+) - \exp(2i\delta_l^-)) \sin \theta P_l'(\cos \theta), \quad (\text{XIII. 25})$$

здесь δ_l^\pm — фазовые сдвиги (в радиальных волновых функциях) для состояний с определенными значениями орбитального момента l и полного момента $j = l \pm 1/2$.

Амплитуды процессов столкновения обладают определенными *аналитическими* и *унитарными* свойствами. В частности для амплитуды рассеяния в потенциале $U(\mathbf{r})$ справедливо условие унитарности⁸⁾

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) - f^*(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = \frac{ik}{2\pi} \int f(\mathbf{k}', \mathbf{k}_0) f^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) d\Omega' \quad (\text{XIII. 26})$$

(при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ оно воспроизводит оптическую теорему).

⁸⁾ Оно является следствием *унитарности S-матрицы*. Такой же вид имеет условие унитарности и для рассеяния составных частиц, но лишь при таких значениях энергии, при которых невозможны неупругие процессы («упругая» унитарность).

Отражением аналитических свойств амплитуд являются *дисперсионные соотношения* для них. Наиболее простыми аналитическими свойствами обладает амплитуда рассеяния на угол $\theta = 0$ в центральном потенциале, рассматриваемая как функция энергии⁹⁾ в комплексной плоскости E . Она удовлетворяет (на физическом листе) дисперсионному соотношению вида:

$$f(E, 0) = f^B(0) + \sum_n \frac{d_n}{E - E_n} + \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\text{Im} f(E', 0)}{E' - E} dE'. \quad (\text{XIII. 27})$$

Здесь $f^B(0)$ — борновская амплитуда, см. (XIII. 6); суммирование ведется по всем уровням дискретного спектра, существующим в потенциале, при этом вычит в соответствующем полюсе

$$d_n = -(-1)^{l_n} (2l_n + 1) \hbar^2 A_n^2 / 2m \quad (\text{XIII. 28})$$

определяется нормировочным коэффициентом в асимптотике на больших расстояниях радиальной функции связанного состояния, $rR_n \approx A_n \exp(-\kappa_n r)$, с моментом l_n , см. [1].

§ 1. Борновское приближение

13.1. Найти в борновском приближении амплитуду рассеяния и полное сечение рассеяния частиц в указанных ниже полях. (Исследовать предельные случаи медленных и быстрых частиц. Указать условия применимости результатов.)

a) $U(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-r/R}$; б) $U(r) = \alpha \delta(r - R)$;

в) $U(r) = U_0 e^{-r/R}$; г) $U(r) = \frac{\alpha}{r^2}$;

д) $U(r) = \begin{cases} U_0, & r < R, \\ 0, & r > R; \end{cases}$ е) $U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}$.

13.2. Показать, что при больших энергиях частицы, $kR \gg 1$, полное сечение рассеяния в потенциале

⁹⁾ Она имеет следующие особые точки: $E = 0$ и $E = \infty$ — точки ветвления и полюсы E_n на вещественной полуоси $E < 0$, совпадающие с положением дискретных уровней частицы.

$U(r)$ в борновском приближении описывается выражением¹⁰⁾

$$\sigma(E) \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{m}{2\hbar^2 E} \iint_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} U(\rho, z) dz \right]^2 d^2\rho$$

(импульс частицы до рассеяния направлен вдоль оси z ; ρ — двумерный радиус-вектор в перпендикулярной ей плоскости).

Применить полученный результат к полю $U(r) = U_0 \exp(-r^2/R^2)$ и к прямоугольной потенциальной яме (барьеру) глубиной U_0 и радиусом R ; сравнить с 13.1.

13.3. Получить выражение для амплитуды рассеяния частиц в борновском приближении в случае потенциала, имеющего *обменный* характер¹¹⁾, так что $\hat{U}_{\text{обм}}\Psi(\mathbf{r}) \equiv U(r)\Psi(-\mathbf{r})$.

Как амплитуда рассеяния в этом случае связана с амплитудой рассеяния на обычном потенциале $U(r)$? Каково угловое распределение при рассеянии быстрых частиц?

13.4. Найти дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния быстрых электронов на атоме водорода, находящемся в основном состоянии, пренебрегая поляризацией атома, см. также 13.77.

13.5. То же, что и в предыдущей задаче, для атома гелия. Волновую функцию атома выбрать на основании вариационного расчета, выполненного в 11.6.

13.6. Найти зависимость от Z сечения упругого рассеяния быстрых электронов нейтральным атомом с $Z \gg 1$; воспользоваться моделью Томаса — Ферми.

13.7. Выразить в борновском приближении амплитуду рассеяния на двух одинаковых силовых центрах, находящихся на расстоянии a друг от друга, так что $U(\mathbf{r}) = U_0(r) + U_0(|\mathbf{r} - \mathbf{a}|)$, через амплитуду рассеяния $f_0^B(q)$ на одном центре $U_0(r)$.

Используя полученное соотношение, обсудить связь между дифференциальными сечениями рассеяния быстрого электрона на атоме и на двухатомной

¹⁰⁾ В связи с данной задачей см. также 13.14, 13.51, 13.52.

¹¹⁾ Применительно к задаче двух тел $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ и такой потенциал описывает взаимодействие, в результате которого происходит перестановка (*обмен*) частиц. Такое взаимодействие естественным образом возникает в задачах ядерной физики.

молекуле (из одинаковых атомов; при этом усреднить полученный результат по различным ориентациям оси молекулы, считая их равновероятными).

Найти соотношения между сечениями рассеяния на двух и на одном центрах в случаях:

а) $ka \ll 1$ (при этом величина kR может быть произвольной, R — радиус действия сил отдельного центра);

б) $kR \sim 1$ и $a \gg R$ (т. е. расстояние между центрами много больше радиуса действия сил отдельного центра).

13.8. Обобщить результат предыдущей задачи на случай системы из произвольного числа N одинаковых центров, расположенных в точках \mathbf{a}_n , $n = 1, 2, \dots, N$.

Обсудить характерные особенности углового распределения рассеянных частиц при упорядоченном расположении большого числа ($N \gg 1$) центров вдоль прямой линии с одинаковым расстоянием b между ближайшими соседями.

13.9. В борновском приближении найти амплитуду рассеяния для столкновения двух протяженных частиц, взаимодействующих друг с другом электростатическим образом. Частицы считаются протяженными в том смысле, что они характеризуются некоторым распределением заряда $\rho_{1,2}(r)$, предполагающимся сферически симметричным относительно центра масс соответствующей частицы¹²⁾ и не изменяющимся в процессе столкновения. Выразить амплитуду рассеяния через формфакторы $F_{1,2}(q)$ зарядовых плотностей $\rho_{1,2}(r)$.

13.10. Получить выражение члена n -го порядка ряда теории возмущений для амплитуды рассеяния частицы в потенциале $U(r)$.

Указание. Предварительно получить согласно (XIII.5,4) интегральное уравнение для амплитуды рассеяния (уравнение Липпмана — Швингера).

13.11. В борновском приближении амплитуда рассеяния вперед (на угол $\theta = 0$) является веществен-

¹²⁾ Неточность распределения заряда указывает на составной характер сталкивающихся частиц (сравнить, например, с 13.4). Так как, однако, изменением их внутренних состояний в процессе столкновения пренебрегается, то задача сводится к обычной задаче рассеяния двух тел. В связи с данной задачей см. также 13.80.

ной величиной и поэтому не удовлетворяет оптической теореме (XIII.11). Почему это обстоятельство не противоречит успешному описанию дифференциального и полного сечений рассеяния в рамках борновского приближения в условиях его применимости?

Написать выражение для амплитуды рассеяния во втором порядке теории возмущений. Найти $\text{Im } f^{(2)}(E, \theta = 0)$ и объяснить полученный результат.

13.12. Найти во втором порядке теории возмущений амплитуду рассеяния на потенциале Юкавы $U(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-r/R}$. Сравнить $f^{(1)}$ и $f^{(2)}$ для различных значений энергии и угла рассеяния.

13.13. Найти во втором порядке теории возмущений амплитуду рассеяния в потенциале $U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}$ при больших передаваемых импульсах, $qR \gg 1$. Сравнить вещественную и мнимую части $f^{(2)}$ друг с другом и с борновской амплитудой.

13.14. Показать, что амплитуда рассеяния второго приближения теории возмущений при больших энергиях, $kR \gg 1$, и передаваемых импульсах¹³⁾ $qR \leq 1$ описывается выражением

$$f^{(2)} \approx i \frac{m^2}{4\pi\hbar^4 k} \iint \left[\int_{-\infty}^{\infty} U(\vartheta, z) dz \right]^2 \exp(-i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \vartheta) d^2\vartheta$$

(R — радиус потенциала). Применить полученный результат к потенциалу $U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}$ и сравнить с 13.13.

13.15. Из решения уравнения Липпмана — Швингера (см. 13.10) найти амплитуду рассеяния частицы в случае сепарабельного потенциала, ядро которого имеет вид $U(r, r') = \lambda \chi(r) \chi^*(r')$. Каково угловое распределение и полное сечение рассеяния?

13.16. Сравнить при $E = 0$ значения точной и борновской амплитуд рассеяния в потенциале $U(r)$ в случаях:

¹³⁾ Эта область переданных импульсов вносит доминирующий вклад в полное сечение рассеяния. При этом $|\mathbf{q}_{\perp}| \approx q$, где \mathbf{q}_{\perp} — перпендикулярная первоначальному импульсу \mathbf{k}_0 (направленному вдоль оси z) составляющая \mathbf{q} . Заметим, что из выражения для $f^{(2)}$ согласно оптической теореме следует результат борновского приближения для сечения рассеяния, сравнить с 13.11.

а) потенциала отталкивания $U(r) \geq 0$;

б) потенциала притяжения, в котором, однако, нет связанных состояний (т. е. потенциальная яма достаточно «мелкая»).

Показать, что борновское приближение в случае а) дает завышенное, а в случае б), наоборот, заниженное значение сечения рассеяния.

13.17. В борновском приближении получить выражение для амплитуды рассеяния заряженной частицы магнитным полем $\mathcal{H}(\mathbf{r})$. Убедиться в калибровочной инвариантности полученного результата¹⁴⁾.

§ 2. Фазовая теория рассеяния

13.18. Получить выражение для фазовых сдвигов непосредственно из разложения по парциальным волнам амплитуды рассеяния в центральном потенциале в борновском приближении.

Указание. Воспользоваться формулой (XIII.8) и теоремой сложения для функций Бесселя.

13.19. Найти фазовые сдвиги в поле $U(r) = \alpha/r^2$, $\alpha > 0$.

Выполнить суммирование ряда (XIII.9) разложения амплитуды по парциальным волнам в случаях:

а) $m\alpha/\hbar^2 \ll 1$ при произвольном угле рассеяния;

б) $m\alpha/\hbar^2 \gtrsim 1$ при достаточно малом угле рассеяния;

в) $m\alpha/\hbar^2 \gg 1$ при рассеянии частиц назад ($\theta = \pi$).

Найти в указанных случаях дифференциальное сечение рассеяния и сравнить его с результатами расчетов в борновском приближении и согласно классической механике.

13.20. Найти волновую функцию $\Psi_{\mathbf{k}_0}^+(\mathbf{r})$, амплитуду рассеяния и сечение рассеяния частицы на потенциале нулевого радиуса (см. 4.10). Каково значение эффективного радиуса r_0 ?

13.21. Восстановить потенциал взаимодействия $U(r)$ по фазе s -рассеяния $\delta_0(k)$, считая ее известной при всех энергиях частицы и предполагая, что $|\delta_0(k)| \ll 1$.

Для иллюстрации полученного результата рассмотреть зависимости вида: а) $\delta_0(k) = \text{const}$; б) $\delta_0(k) = \alpha k / (1 + \beta k^2)$.

¹⁴⁾ В связи с данной задачей см. также 13.24.

13.22. Получить выражение для фазовых сдвигов в борновском приближении в случае обменного потенциала (см. 13.3).

13.23. Развить фазовую теорию рассеяния в случае двумерного движения частицы в аксиально-симметричном потенциале $U(\rho)$. Каково обобщение оптической теоремы на этот случай?

13.24. Используя фазовую теорию рассеяния, найти амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния заряженных частиц в аксиально-симметричном магнитном поле $\mathcal{H}(\rho)$, направленном вдоль оси z и локализованном на малых расстояниях $\rho \leq a$ около этой оси.

Указание. Ограничиться предельным случаем $a \rightarrow 0$, но конечной величины Φ_0 потока магнитного поля. При этом векторный потенциал удобно выбрать в виде $A_\varphi = \Phi_0/2\rho r$, $A_z = A_\rho = 0$. Отметим, что рассеяние под малыми углами иным способом рассмотрено в [1, § 131].

13.25. Найти энергетическую зависимость фазовых сдвигов $\delta_l(k)$ с фиксированным значением l при $k \rightarrow \infty$. Рассмотреть случаи потенциалов, имеющих на малых расстояниях $r \rightarrow 0$ вид $U \approx \alpha/r^\nu$ с а) $\nu < 1$; б) $1 < \nu < 2$; в) $\nu = 1$.

13.26. Показать, что при больших значениях энергии и момента, когда $kR \sim l \gg 1$, борновское выражение (XIII.12) для фазового сдвига переходит в квазиклассическое (XIII.14).

Указание. Воспользоваться «приближением тангенсами» для функций Бесселя, см. [33, с. 977].

§ 3. Низкоэнергетическое рассеяние.

Резонансные явления при рассеянии

13.27. Найти энергетическую зависимость сечения рассеяния $\sigma(E)$ в поле, спадающем на больших расстояниях по закону $U(r) \approx \alpha/r^\nu$, $r \rightarrow \infty$, $2 < \nu \leq 3$ при энергии частиц $E \rightarrow 0$.

13.28. Найти зависимость от k фазовых сдвигов $\delta_l(k)$ для медленных частиц и обсудить разложение эффективного радиуса в борновском приближении. При каких ограничениях на убывание потенциала на больших расстояниях справедливо разложение (XIII.15), т. е. можно ввести параметры низкоэнергетического рассеяния — длину рассеяния a_l и

эффективный радиус взаимодействия r_l — с моментом l ?

13.29. Для потенциала со степенным убыванием на больших расстояниях, $U \approx \alpha/r^\nu$, $\nu > 2$, найти зависимость от k фазовых сдвигов для медленных частиц с различными значениями момента l . Рассмотреть приложения полученных результатов к потенциалам, имеющим на больших расстояниях вид $U \approx \alpha/r^3$ и $U \approx \alpha/r^4$ (поляризационный потенциал, см. 11.49).

13.30. Для потенциала со степенным убыванием на больших расстояниях, $U \approx \alpha/r^\nu$, обсудить модификацию разложения эффективного радиуса (XIII.15) при орбитальном моменте частицы l , удовлетворяющем условиям $(\nu - 5)/2 \leq l < (\nu - 3)/2$. В качестве иллюстрации полученного результата рассмотреть s -расстояние медленных частиц в потенциале, имеющем на больших расстояниях вид $U \approx \alpha/r^4$.

13.31. Найти длину рассеяния a_0 в потенциалах:

$$a) U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ 0, & r > R; \end{cases}$$

$$б) U(r) = -U_0 R \delta(r - R);$$

$$в) U(r) = -U_0 e^{-r/R}; \quad з) U(r) = -U_0 [1 + (r/R)^2]^{-2};$$

$$д) U(r) = U_0 (R/r)^4, \quad U_0 > 0.$$

Чем примечательны значения параметров потенциала, при которых длина рассеяния обращается в бесконечность?

Какова причина неаналитической зависимости $a_0(U_0)$ от параметра U_0 при $U_0 \rightarrow 0$ в случае д)?

13.32. Найти длину рассеяния и сечение рассеяния медленных частиц непроницаемым эллипсоидом, т. е. в потенциале

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} \infty, & (x^2 + y^2)/b^2 + z^2/c^2 < 1, \quad c \geq b, \\ 0, & (x^2 + y^2)/b^2 + z^2/c^2 \geq 1. \end{cases}$$

Специально обсудить предельные случаи $c \approx b$ и $c \gg b$.

13.33. В квазиклассическом приближении найти длину рассеяния a_0 для отталкивательного потенциала, имеющего асимптотическое поведение $U \approx \alpha/r^4$ на больших расстояниях.

Для иллюстрации полученного квазиклассического результата применить его к потенциалам а) $U = \alpha(R^2 + r^2)^{-2}$ и б) $U = \alpha(R + r)^{-4}$, где $R > 0$, и сравнить с точным.

13.34. В условиях предыдущей задачи найти квазиклассическую поправку к длине рассеяния, связанную с учетом следующего члена в разложении потенциала на больших расстояниях: $U = \alpha r^{-4}(1 + b/r + \dots)$.

13.35. Для потенциала притяжения, $U(r) \leq 0$, имеющего степенное убывание $U \approx -\alpha/r^v$ с $v > 3$ на больших расстояниях, найти длину рассеяния a_0 в квазиклассическом приближении. При этом считать, что на малых расстояниях $r \rightarrow 0$ потенциал $U \propto r^{-\beta}$ и $0 \leq \beta < 2$. Чем примечательны значения параметров потенциала, при которых a_0 обращается в бесконечность?

Рассмотреть приложения полученного результата к потенциалам а) $U = -\alpha(r + R)^{-4}$ и б) $U = -\alpha(r^2 + R^2)^{-2}$ и сравнить с точным решением.

13.36. Получить формулу теории возмущений по длине рассеяния для сдвига уровня с произвольным моментом l в потенциале $U_L(r)$ под влиянием короткодействующего потенциала $U_S(r)$ радиуса r_S (обобщение результата 11.4 для $l = 0$). Предполагается, что на малых расстояниях $r \leq r_S$ взаимодействие U_L является слабым, $|U_L| \ll \hbar^2/mr_S^2$, и для рассматриваемых уровней

$$|E_{n,l}^{(0)}| \ll \hbar^2/mr_S^2.$$

13.37. Потенциал представляет суперпозицию сильного короткодействующего потенциала $U_S(r)$ радиуса r_S и дальнедействующего $U_L(r)$ радиуса $r_L \gg r_S$, причем последний на расстояниях $r \leq r_S$ предполагается слабым: $|U_L| \ll \hbar^2/mr_S^2$. Считая известным решение уравнения Шрёдингера для потенциала $U_L(r)$, найти изменение $\Delta\delta_l^{(S)}$ фазового сдвига в этом потенциале под влиянием U_S в случае медленных частиц, когда $kr_S \ll 1$. Выразить $\Delta\delta_l^{(S)}$ через длину рассеяния $a_l^{(S)}$ в потенциале U_S .

В каком случае фазовый сдвиг в поле $U = U_S + U_L$ приближенно равен сумме фазовых сдвигов в потенциалах U_S и U_L в отдельности?

Рассмотреть приложение полученного результата к дальнедействующему кулоновскому потенциалу.

Указание. Воспользоваться изложенным в 11.4 приемом учета влияния короткодействующего взаимодействия, см. также 13.36.

13.38. Как надо модифицировать формулу Резерфорда, чтобы описать дифференциальное сечение рассеяния частиц в кулоновском потенциале, $U = \pm Ze^2/r$, искаженном на малых расстояниях $r \leq r_s$? Предполагается, что выполнены условия $kr_s \ll 1$ и $Ze^2 \ll \hbar v$. Искажение кулоновского поля описывается потенциалом $U_s(r)$, для которого известна длина рассеяния $a_0^{(s)}$.

13.39. Найти длину рассеяния a_l с произвольным моментом l для следующих потенциалов:

а) непроницаемая сфера радиуса R ; б) $U(r) = -\alpha\delta(r-R)$; в) прямоугольная яма радиуса R и глубины U_0 .

Сравнить со случаем $l = 0$ из 13.31.

13.40. Оценить значение синглетной (с суммарным электронным спином $S = 0$) длины рассеяния $a_0(1)$ электрона на невозбужденном атоме водорода, учитывая существование слабосвязанного состояния — иона H^- — с энергией связи $\epsilon_0 = 0,754$ эВ $= 0,0277$ а. е. и

а) пренебрегая конечностью размера атома водорода и области взаимодействия внешнего электрона с атомом;

б) рассматривая внешний электрон как слабосвязанный в потенциале конечного радиуса и используя для него значение $C_{\infty 0}^2 = 2,65$ асимптотического коэффициента (см. 11.36).

Сравнить с результатом вариационного расчета: $a_0(1) = 5,97$ а. е.

13.41. Для протон-нейтронной системы оценить значение триплетной длины рассеяния $a_0(3)$, учитывая существование в такой системе слабосвязанного состояния — дейтрона — с энергией связи $\epsilon_0 = 2,23$ МэВ. Сравнить с экспериментальным значением $a_0(3) = 5,39 \cdot 10^{-13}$ см.

13.42. а) Используя экспериментальное значение синглетной длины рассеяния $a_0(1) = -23,7 \cdot 10^{-13}$ см для протон-нейтронной системы, оценить энергию

мелкого виртуального уровня¹⁵⁾ в такой системе в состоянии с $S = 0$ и $l = 0$.

б) Для протон-протонной системы $a_0(1) = -7,77 \times 10^{-13}$ см. Не противоречит ли такое существенное различие длин рассеяния для рп- и рр-систем изотопической инвариантности ядерного взаимодействия? В связи с этим приведем значения эффективных радиусов взаимодействия $r_0(1)$, равные $2,67 \cdot 10^{-13}$ см и $2,77 \cdot 10^{-13}$ соответственно для рп- и рр-систем.

13.43. Показать, что для эффективного радиуса взаимодействия r_0 , см. (XIII. 15), справедливо выражение

$$r_0 = 2 \int_0^{\infty} \left\{ \left(-\frac{r}{a_0} + 1 \right)^2 - \chi_0^2(r) \right\} dr,$$

где $\chi_0(r)$ — радиальная волновая функция ($\chi_0 = rR_0$) состояния с $l = 0$ и $E = 0$, нормированная условием $\chi_0(r) = (-r/a_0 + 1)$ при $r \rightarrow \infty$ (a_0 — длина рассеяния).

Найти r_0 для непроницаемой сферы радиуса R , а также для δ -ямы, $U(r) = -\alpha\delta(r - R)$, и прямоугольной ямы радиуса R в момент возникновения в них связанных состояний, когда $a_0 = \infty$.

13.44. Показать, что эффективный радиус взаимодействия r_l в состоянии с $l \neq 0$, см. (XIII. 15), в момент появления в потенциале связанного состояния¹⁶⁾ равен

$$r_l = -2 [(2l - 1)!!]^2 C_l^{-2},$$

где C_l — нормировочный коэффициент в волновой функции с $E = 0$, при этом

$$\chi_l(r) \approx C_l r^{-l} \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty \quad \text{и} \quad \int_0^{\infty} \chi_l^2(r) dr = 1.$$

Найти r_l для δ -ямы.

¹⁵⁾ Виртуальный характер уровня и знак $a_0(1) < 0$ следуют из факта отсутствия реального связанного состояния. С учетом эффективного радиуса $r_0(1)$ следует $\epsilon_{\text{вирт}} = 67$ кэВ.

¹⁶⁾ Этот случай наиболее интересен, так как в отсутствие в потенциале мелкого уровня слагаемое с эффективным радиусом в (XIII. 15) выступает как малая поправка.

13.45. Найти фазовый сдвиг $\delta_0(k)$ и сечение рассеяния медленных частиц:

а) непроницаемой сферой радиуса R ;

б) δ -ямой, $U(r) = -\alpha\delta(r - R)$;

в) прямоугольной ямой радиуса R и глубины U_0 .

Воспользоваться разложением эффективного радиуса.

13.46. Рассмотреть рассеяние медленных частиц в парциальной волне с моментом $l \neq 0$ в потенциале $U(r) = -\alpha\delta(r - R)$. Специально обсудить случай резонансного рассеяния в условиях существования в потенциале квазистационарного состояния с малой энергией $E_R \ll \hbar^2/mR^2$, найти его ширину Γ_R .

13.47. На примере модельной задачи: потенциальная яма глубины U_0 и радиуса R , окруженная δ -барьером $\tilde{U}(r) = \alpha\delta(r - R)$ (рис. 28), обсудить особенности резонансного рассеяния медленных частиц в s -состоянии, связанные с наличием малопроницаемого барьера¹⁷⁾.

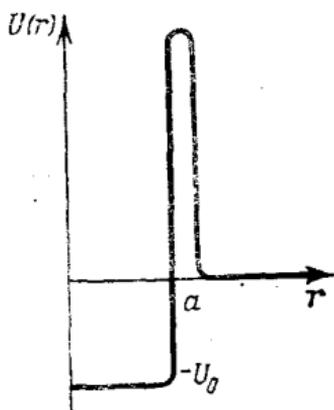


Рис. 28

Указание. Воспользоваться разложением эффективного радиуса, обсудить влияние малопроницаемого барьера на значение эффективного радиуса взаимодействия r_0 .

13.48. Найти парциальную амплитуду s -рассеяния в потенциале $U(r) = \alpha\delta(r - R)$. В случае малой проницаемости δ -барьера определить положения $E_{R, n}$ и ширины $\Gamma_{R, n}$ нижних квазидискретных s -уровней (с $E_{R, n} \sim \hbar^2/mR^2$).

Сравнить сечения рассеяния на δ - и непроницаемой сферах. Каково значение $\Delta\sigma(E)$ разности этих сечений при энергии частиц, близкой к энергии квазидискретного уровня?

13.49. Параметры потенциала $U_0(r)$ выбраны так, что в нем имеется связанное состояние с энергией $E = 0$ и моментом l (длина рассеяния $a_l^{(0)} = \infty$).

¹⁷⁾ Для физических приложений особенно интересен случай, когда такой барьер связан с кулоновским отталкиванием заряженных частиц. Однако ввиду медленного убывания кулоновского потенциала этот случай требует специального рассмотрения, см. [1, § 138].

Найти длину рассеяния a_l в этой парциальной волне при малом изменении потенциала на $\delta U(r)$.

Используя полученный результат, обсудить вопрос о различии зависимостей энергии уровня от $\delta U(r)$ в случаях $l = 0$ и $l \neq 0$; сравнить с 4.27 и 4.28.

§ 4. Рассеяние быстрых частиц.

Приближение эйконала

13.50. Получить выражение (XIII.18) для амплитуды рассеяния быстрых частиц суммированием ряда разложения ее по степеням потенциала (кратности взаимодействия), см. 13.10.

13.51. Показать, что полное сечение рассеяния быстрых частиц, $kR \gg 1$, в потенциале $U(r)$ радиуса R может быть вычислено по формуле

$$\sigma(E) = 4\pi \int_0^\infty \left\{ 1 - \cos \left[\frac{m}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz \right] \right\} \rho d\rho$$

независимо от соотношения между энергией частиц и характерной величиной потенциала, т. е. справедливость формулы не предполагает выполнения условия $E \gg |U(r)|$ применимости приближения эйконала.

Использовать полученный результат для вычисления сечения рассеяния частиц потенциальным барьером (или ямой): $U = U_0$ при $r < R$ и $U = 0$ при $r > R$.

13.52. Найти полное сечение рассеяния частиц в потенциале $U(r) = \alpha/r^\nu$ с $\nu > 2$ и $\alpha > 0$ при энергии $E \rightarrow \infty$. Сравнить с 13.2.

13.53. Рассмотреть «потенциал» вида $U = g(E)e^{-r/R}$, экспоненциально спадающий на больших расстояниях и с константой связи¹⁸⁾, возрастающей степенным образом с увеличением энергии: $g(E) = g_0(E/E_0)^n$. Показать справедливость следующего ограничения: $\sigma(E) \leq \sigma_0 \ln^2(E/E_0)$ на возможный рост сечения рассеяния при $E \rightarrow \infty$.

¹⁸⁾ Отметим, что спин-орбитальное взаимодействие, $\hat{U} = \hat{\mathbf{s}} \hat{\mathbf{l}} f(r)$, эффективно растет, $\propto \sqrt{E}$, с увеличением E , сравнить с 13.59. Обсуждаемое ограничение на рост сечения в теории сильных взаимодействий элементарных частиц известно как *теорема Фруассара*.

13.54. В приближении эйконала найти амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния частиц в кулоновском потенциале $U = \alpha/r$ в противоположном борновскому предельном случае $|\alpha|/\hbar v \gg 1$, сравнить с 13.1.

Указание. При вычислении амплитуды считать кулоновский потенциал «обрезанным» на некотором большом, но конечном, расстоянии R (т. е. положить $U = 0$ для $r > R$).

13.55. Выразить в приближении эйконала амплитуду рассеяния частиц в поле двух силовых центров, находящихся на расстоянии a друг от друга, т. е. в потенциале $U(\mathbf{r}) = U_0(|\mathbf{r} - \mathbf{a}/2|) + U_0(|\mathbf{r} + \mathbf{a}/2|)$, через амплитуду f_0 рассеяния на одном центре $U_0(r)$. Какова связь полного сечения рассеяния с одноцентровым σ_0 ?

Применить полученный результат к вычислению полного сечения рассеяния на слабо связанной системе из двух центров (подобной дейтрону), когда ее характерный размер много больше радиуса взаимодействия налетающей частицы с отдельным центром.

13.56. Обобщить приближение эйконала на случай обменного взаимодействия, когда $\hat{U}_{\text{обм}}\Psi(\mathbf{r}) \equiv \equiv U(r)\Psi(-\mathbf{r})$. Какова связь дифференциальных и полных сечений рассеяния для обменного и обычного потенциалов? Сравнить с рассеянием в борновском приближении, рассмотренным в 13.3.

13.57. В случае рассеяния быстрых частиц, $kR \gg 1$, идеально отражающей (непроницаемой) сферой радиуса R найти амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния под малыми углами, когда $kR\theta \leq 1$, а также полное сечение столкновения. Воспользоваться квазиклассическим выражением (XIII.13) для фазового сдвига.

13.58. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае не очень малых углов рассеяния $\theta \gg (kR)^{-1/3}$. Сравнить с результатом классической механики.

§ 5. Рассеяние частиц со спином

13.59. Оператор взаимодействия частицы со спином $s = 1/2$ с внешним полем имеет вид¹⁹⁾

$$\hat{U} = U_0(r) + U_1(r)\hat{\sigma}\hat{1}.$$

¹⁹⁾ Классический аналог спин-орбитального взаимодействия $U(r)\hat{\sigma}\hat{1}$ рассмотрен в 13.60. Если для частицы со спином $s =$

Рассмотреть рассеяние в борновском приближении. Какова энергетическая зависимость полного сечения рассеяния для быстрых частиц? Сравнить с рассеянием бесспиновых частиц.

Найти зависящую от спина часть амплитуды рассеяния электрона в кулоновском поле ядра, $U_0 = -Ze^2/r$, учитывая, что спин-орбитальное взаимодействие для него описывается выражением $U_1 = (\hbar^2/4m^2c^2r) \partial U_0 / \partial r$.

13.60. Найти в борновском приближении амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния быстрых нейтронов кулоновским полем.

Указание. Сначала установить вид взаимодействия движущегося магнитного диполя с электрическим полем в классической электродинамике, перейдя в систему покоя диполя.

13.61. Какие ограничения накладывает условие эрмитовости гамильтониана на взаимодействие $\hat{U} = U_0(r) + U_1(r) \hat{1} \hat{\sigma}$ частицы со спином $s = 1/2$ с внешним полем?

Какова в первом борновском приближении поляризация рассеянных частиц, если первоначально они были не поляризованы? Показать также, что если до столкновения частицы были поляризованы, то в результате рассеяния происходит лишь поворот вектора поляризации.

13.62. Найти поляризацию, возникающую при рассеянии быстрых (так что $Ze^2/\hbar v \ll 1$) неполяризованных электронов в кулоновском поле ядра. Какова поляризация при рассеянии позитронов?

Указание. Спин-орбитальное взаимодействие указано в 13.59. При вычислении амплитуды второго приближения теории возмущений рассмотреть сначала экранированный кулоновский потенциал $U_0(r) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-r/R}$ и в окончательном результате перейти к пределу $R \rightarrow \infty$ (сравнить с 13.54).

$= 1/2$ записать магнитный момент в виде $\mu_0 = e\hbar/2mc + \mu'$, где e , m — заряд и масса частицы, а μ' — ее аномальный магнитный момент, то правильное квантовомеханическое обобщение классического результата из 13.60 получается при подстановке вместо μ оператора вида $\mu'_0 \hat{\sigma}$ с $\mu'_0 = e\hbar/4mc + \mu'$; см. 15.32, а также [29].

13.63. Взаимодействие частицы со спином $s = 1/2$ с внешним полем имеет вид $\hat{U} = U_0(r) + U_1(r) \hat{1} \hat{\sigma}$.

Найти фазовые сдвиги δ_l^\pm :

а) в борновском приближении,

б) в квазиклассическом приближении.

Получить также выражение для амплитуды рассеяния в приближении эйконала, исходя из разложений (XIII.25) по парциальным волнам.

13.64. Для столкновения частицы со спином $s = 1/2$ с бесспиновой частицей найти связь между амплитудами рассеяния в спиральном представлении (см. 5.20) и инвариантными функциями A и B в (XIII.22).

13.65. При столкновении двух бесспиновых частиц происходит реакция с образованием также двух частиц, одна из которых имеет спин $s = 1$, а другая — спин $s = 0$. Внутренние четности всех частиц — положительные.

Используя для описания спиновых состояний частицы с $s = 1$ векторное представление (см. 5.26), показать, что спиновая структура амплитуды рассматриваемой реакции описывается выражением

$$\langle f | \hat{f} | i \rangle = \mathbf{a}^* [\mathbf{p}_0 \mathbf{p}_1] f(E, \theta),$$

где \mathbf{a} — спиновая функция, \mathbf{p}_0 и \mathbf{p}_1 — импульсы относительного движения до и после столкновения.

Выполнить разложение $f(E, \theta)$ по парциальным волнам.

Указать также спиновую структуру амплитуды в случае, когда частица со спином $s = 1$ имеет отрицательную внутреннюю четность.

13.66. Бесспиновая частица рассеивается на системе одинаковых, распределенных в пространстве центров со спином $s = 1/2$. Взаимодействие с отдельным центром описывается выражением $\hat{U} = U_0(r) + U_1(r) \hat{1} \hat{\sigma}$. Исследовать в борновском приближении амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния в случае неполяризованных центров ($\mathbf{P}_n = 0$). Сравнить с рассеянием на системе бесспиновых центров.

13.67. Каково обобщение оптической теоремы на случай столкновения частиц с отличными от нуля спинами?

§ 6. Аналитические свойства и унитарность амплитуды рассеяния

13.68. Обсудить аналитические свойства и дисперсионное соотношение для амплитуды рассеяния на потенциале нулевого радиуса, см. 13.20. Рассмотреть случаи как существования, так и отсутствия связанного состояния в таком потенциале. Сравнить с (XIII.27).

13.69. Воспользовавшись дисперсионным соотношением, показать, что для энергетической зависимости сечения рассеяния частицы в потенциале отталкивания, $U(r) \geq 0$, существует следующее ограничение:

$$\int_0^{\infty} \frac{\sigma(E)}{\sqrt{E}} dE < 4\pi^2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{\infty} r^2 U(r) dr.$$

13.70. Показать справедливость соотношения

$$\int_0^{\infty} \frac{\sigma(E)}{\sqrt{E}} dE < \pi \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m}} \sigma(0)$$

для рассеяния в потенциале притяжения, $U(r) \leq 0$, в котором, однако, не существует связанных состояний частицы (яма недостаточно глубокая); здесь $\sigma(0) = 4\pi a_0^2$ — сечение рассеяния при $E = 0$. В каком случае обе части неравенства близки друг к другу?

13.71. Используя только условие унитарности и дисперсионное соотношение (при $q^2 \neq 0$), можно, в принципе, по известному выражению для амплитуды рассеяния в борновском приближении восстановить²⁰⁾ ее в виде ряда по степеням потенциала (кратности) взаимодействия.

Показать на примере амплитуды второго приближения при $q^2 = 0$, что такой расчет ее воспроизводит результат теории возмущений по потенциалу, основанный непосредственно на уравнении Шрёдингера (см. 13.10).

13.72. Считая, что для парциальных волн с $l \geq L_0 \equiv kR \gg 1$ взаимодействие пренебрежимо мало,

²⁰⁾ Подчеркнем, что уравнение Шрёдингера при таком подходе не используется!

получить ограничения сверху на величину амплитуды рассеяния бесспиновых частиц при высоких энергиях для различных углов рассеяния²¹⁾.

Указание. Для углов рассеяния, не очень близких к 0 или π , воспользоваться квазиклассическим выражением для полиномов Лежандра, см. [1, § 49].

13.73. В условиях предыдущей задачи получить ограничение снизу на величину сечения упругого рассеяния σ_{el} быстрых частиц при заданном значении σ_{tot} полного сечения столкновения.

13.74. Найти при больших энергиях ограничение сверху на величину вещественной части амплитуды упругого рассеяния вперед, $\theta = 0$, считая известным полное сечение столкновения и предполагая, что взаимодействие частиц на расстояниях, превышающих R , пренебрежимо мало. Каково ограничение на $|f(E, \theta = 0)|$?

13.75. Показать, что при высоких энергиях имеют место следующие ограничения на производную по θ мнимой части амплитуды упругого рассеяния при $\theta = 0$:

$$\frac{\sigma_{tot}}{32\pi} \leq - \frac{d}{dq^2} \ln \operatorname{Im} f(E, q) \Big|_{q=0} \leq \frac{R^2}{4},$$

$$q = 2k \sin(\theta/2),$$

где σ_{tot} — полное сечение столкновения, а R — радиус взаимодействия (на расстояниях, превышающих R , оно пренебрежимо мало).

Проверить выполнение приведенных ограничений для амплитуды дифракционного рассеяния из 13.57 и 13.90.

13.76. Показать, что амплитуда рассеяния в эйкональном приближении удовлетворяет условию унитарности.

²¹⁾ В задачах 13.72—13.75 рассмотрен ряд простых общих ограничений на свойства амплитуд и сечений взаимодействия частиц при больших энергиях, связанных, в основном, с возможностью пренебрежения взаимодействием на расстояниях, превышающих его радиус R . Такая ситуация характерна для физики элементарных частиц. При этом эффективный радиус взаимодействия растет с энергией, но не быстрее, чем $\propto \ln(E/E_0)$, см. 13.53. Необходимость использования релятивистской кинематики фактически не отражается на полученных результатах.

§ 7. Рассеяние составных частиц. Неупругие столкновения

13.77. Показать, что амплитуда упругого рассеяния электрона на атоме — составной системе — в борновском приближении в пренебрежении обменными эффектами²²⁾ совпадает с амплитудой рассеяния электрона статическим локальным потенциалом $U(r)$, и выяснить его физический смысл. Сравнить с 13.4—6.

13.78. Поляризованный электрон с $s_z = +1/2$ сталкивается с атомом водорода, находящимся в основном состоянии, электрон в котором имеет противоположное значение, $s_z = -1/2$, проекции спина. Найти в первом борновском приближении амплитуду и сечение столкновения с «переворотом» спина (т. е. в случае, когда $s_z = -1/2$ уже у рассеянного электрона, а $s_z = +1/2$ у атомного), атом остается в основном состоянии. Сравнить со случаем упругого рассеяния (без изменения спинового состояния электронов), см. 13.77.

Указание. Иметь в виду, что рассматриваемый процесс относится к числу процессов с «перераспределением» частиц, см. [25], гл. 18.

13.79. Оценить сечение перезарядки при столкновении быстрого позитрона с атомом водорода, находящимся в основном состоянии (т. е. найти сечение образования *позитрония* — водородоподобной системы из электрона и позитрона).

Указание. Воспользоваться приближением *Оппенгеймера — Бринкмана — Крамерса* (ОБК) для процессов перезарядки, основанным на пренебрежении взаимодействием ядер друг с другом (в данном случае — позитрона с протоном); сравнить с предыдущей задачей.

13.80. Выразить в борновском приближении амплитуду процесса $A_i + B_i \rightarrow A_f + B_f$ столкновения быстрых составных частиц A и B , взаимодействующих

²²⁾ В условиях применимости борновского приближения (для быстрых частиц) пренебрежение обменными эффектами оправдано; при этом существенно, что спиновое состояние свободного электрона, как и атомного, в процессе столкновения не изменяется; сравнить с 13.78.

электростатическим образом, через *электрические формфакторы*²³⁾

$$eF_{if}^{A(B)}(\mathbf{q}) = \langle \Psi_{A(B)f} | \sum_a e_a \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a) | \Psi_{A(B)i} \rangle$$

для соответствующих переходов $i \rightarrow f$.

Обсудить поведение формфактора при $\mathbf{q} \rightarrow 0$ в зависимости от квантовых чисел начального и конечного состояний.

Рассчитать для атома водорода формфакторы переходов $1s \rightarrow 1s$, $1s \rightarrow 2s$, $1s \rightarrow 2p_m$; обратить внимание на их поведение при $q \rightarrow \infty$.

Найти сечения столкновений для следующих процессов:

1) $H(1s) + H(1s) \rightarrow H(1s) + H(1s)$ — упругое рассеяние атомов водорода друг другом;

2) столкновения заряженной бесструктурной частицы (электрона, мюона, протона и т. д., но не иона!) с атомом водорода, находящимся в основном состоянии, сопровождающегося возбуждением а) $2s$ -, б) $2p$ -состояний атома.

13.81. Рассмотреть столкновение быстрой заряженной частицы с двухатомной молекулой, имеющей собственный дипольный момент d_0 и находящейся в основном состоянии; электронный терм молекулы $^1\Sigma$. Оценить сечения столкновений, сопровождающихся возбуждением различных вращательных и колебательных уровней молекулы; сравнить со случаем столкновений с атомом, см. предыдущую задачу.

13.82. Найти сечение столкновения быстрой заряженной частицы с атомом водорода, находящимся в метастабильном $2s$ -состоянии, сопровождающегося переходом атома в $2p$ -состояния.

Указание. В данной задаче необходимо учитывать релятивистское расщепление s - и p -уровней, см. 11.62.

13.83. Найти с *логарифмической точностью* сечение расщепления быстрого дейтрона в кулоновском поле ядра с зарядом Ze (ядро, для простоты, считать точечным и бесконечно тяжелым). Волновую

²³⁾ Подчеркнем, что \mathbf{r}_a является радиусом-вектором a -й заряженной частицы в составной системе $A(B)$ относительно центра масс этой системы.

Обычный *атомный формфактор*, см. [1], § 139, соответствует случаю, когда атом до и после столкновения находится в основном состоянии, при этом $F_{00}(\mathbf{q}) = Z - F_{ат}(\mathbf{q})$.

функцию дейтрона, учитывая малость энергии связи протона и нейтрона, выбрать как в случае потенциала нулевого радиуса, см. 12.1.

13.84. Найти асимптотику при $q \rightarrow \infty$ электрического формфактора двухчастичной системы. Предполагается, что фурье-компонента $\tilde{U}(q)$ потенциала взаимодействия, ответственного за образование составной системы, при $q \rightarrow \infty$ имеет степенное убывание: $\tilde{U}(q) \propto q^{-n}$ с $n > 1$; сравнить с 4.18. Рассмотреть приложения полученных результатов к атому водорода.

13.85. Найти дифференциальное и полное сечения кулоновского возбуждения атомного ядра, находящегося первоначально в состоянии с моментом $J = 0$, быстрой легкой заряженной частицей²⁴⁾ при а) дипольном ($E1-$) и б) монополюсном ($E0-$) переходе ядра.

13.86. Найти соотношения между амплитудами и дифференциальными сечениями упругого рассеяния нейтрона на протоне и нейтрона на атоме водорода, находящемся в основном состоянии. Взаимодействием магнитного момента нейтрона с электроном пренебречь. Указать условия применимости полученного результата.

13.87. Найти сечение рассеяния тяжелых заряженных частиц (например, протонов или ионов) нейтральными атомами, имеющими момент, равный нулю. Скорость рассеиваемых частиц предполагается много меньшей скоростей атомных электронов, но в то же время $V \gg \hbar/Ma_B$, M — масса частицы. Воспользоваться квазиклассическим выражением для сечения рассеяния, см. 13.51.

13.88. Найти сечение *перезарядки*²⁵⁾ при столкновении медленного, $v \ll v_{ат}$, отрицательного иона A^- с собственным атомом A . Считать атом и ион находящимися в S -состояниях, а валентный электрон иона рассматривать как слабо связанный, см. 11.28. Относительное движение атома и иона рассматривать

²⁴⁾ Частицей (электрон, мюон), *комптоновская* длина волны которой \hbar/mc превосходит размер ядра; заряд частицы $\pm e$.

²⁵⁾ Сравнить с перезарядкой при столкновении медленного протона с атомом водорода, см. [14, с. 99], а также монографию [19], в которой изложена теория резонансных процессов при медленных столкновениях атомных частиц.

квазиклассически в приближении прямолинейных траекторий.

13.89. Для столкновения одинаковых атомов, один из которых находится в основном состоянии, а другой — в возбужденном состоянии (связаны дипольным переходом), оценить сечение взаимодействия и, в частности, сечение *передачи возбуждения*. Считать орбитальные моменты атомов равными 0 и 1. Скорость относительного движения атомов предполагается малой по сравнению с характерной атомной скоростью, а энергия, наоборот, много большей атомной; сравнить с предыдущей задачей.

Указание. По поводу взаимодействия атомов на далеких расстояниях см. 11.55.

13.90. Найти полное сечение σ_{tot} , сечения упругого σ_{el} и неупругого σ_{inel} рассеяния быстрых частиц, $kR \gg 1$, поглощающей («черной») сферой радиуса R . Найти также дифференциальное сечение упругого рассеяния. Сравнить с 13.57 и 13.58.

Указание. Воспользоваться квазиклассическими представлениями о движении частиц. Считать, что все частицы, достигающие поверхности сферы, поглощаются ею.

13.91. Как известно, в результате взаимодействия электрона с позитроном может произойти их *аннигиляция*, т. е. превращение пары в фотоны. Вследствие этого уровни *позитрония* приобретают ширину, связанную с конечным временем жизни состояний, см. 11.61.

Найти соотношение между шириной уровней Γ_{ns} для s -состояний позитрония и сечением аннигиляции пары $\sigma_{\text{ан}}(v)$.

Указание. Учитывая малость радиуса аннигиляционного взаимодействия, $R_{\text{ан}} \sim \hbar/m_e c \ll a_{\text{В}}$, воспользоваться формулами теории возмущений по длине рассеяния²⁶⁾ для сдвига уровней и для фазового сдвига, см. 13.36 и 13.37.

13.92. С помощью *принципа детального равновесия* связать сечения *радиационного захвата* нейтрона протоном, $n + p \rightarrow d + \gamma$, и *фоторасщепления* дейтрона, $d + \gamma \rightarrow n + p$.

²⁶⁾ Полученные результаты непосредственно обобщаются на случай уширения вследствие сильного взаимодействия кулоновских уровней адронных атомов, см. 11.4.

Указание. Соотношение между сечениями взаимно обратных двухчастичных процессов, выражающее принцип детального равновесия (см. [1], § 144), справедливо и в релятивистской области. Заметим, что хотя спин фотона равен 1, у него имеется лишь два независимых поляризационных состояния (что является отражением *поперечности* электромагнитных волн).

13.93. Найти соотношение между сечениями *фотоэффекта* из основного состояния атома водорода и *радиационной рекомбинации* электрона с протоном (процесс, обратный фотоэффекту) в основное состояние атома водорода.

Г л а в а 14

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

Последовательная теория процессов излучения и поглощения фотонов связана с использованием представления чисел заполнения для фотонной подсистемы. При этом *полю излучения* (т. е. *свободному* электромагнитному полю) сопоставляется оператор векторного потенциала ¹⁾

$$\hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V} \right)^{1/2} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}). \quad (\text{XIV. 1})$$

Здесь $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$, $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+$ — операторы уничтожения и рождения фотона с волновым вектором \mathbf{k} , частотой $\omega_{\mathbf{k}} = c k$ и поляризацией σ ; $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ — единичный ($|\mathbf{e}|^2 = 1$) вектор поляризации фотона, удовлетворяющий *условию поперечности* $\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} = 0$. Состояние поля излучения описывается волновой функцией $\Phi(n_{\mathbf{k}\sigma}, t)$, где $n_{\mathbf{k}\sigma}$ — числа заполнения фотонных состояний.

Оператор Гамильтона свободного поля излучения $\hat{H}_{\text{rad}}^{(0)} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$, а взаимодействие нерелятивист-

¹⁾ Сравнить с $\hat{\Psi}$ -операторами из гл. 10. Для описания поля использована *кулоновская калибровка*: $\text{div } \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} = 0$, $\hat{\Phi}_{\text{rad}} \equiv 0$; оператор $\hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r})$ задан в шрёдингеровском представлении. Объем V , в который считается заключенной система, при $V \rightarrow \infty$ не входит в физически наблюдаемые величины.

ской частицы с этим полем имеет вид²⁾ (в кулоновской калибровке $\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}}$):

$$\hat{V}_{\text{int}} = -\frac{e_a}{mc} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} + \frac{e_a^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}^2(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{s} \hat{\mathbf{s}} \hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}), \quad (\text{XIV. 2})$$

где e_a , m , s , μ — заряд, масса, спин и магнитный момент частицы, $\hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}} = \text{rot } \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r})$.

Взаимодействие частицы (системы частиц) с полем излучения характеризуется малым параметром $\alpha \equiv e^2/\hbar c \approx 1/137$ (для $e_a \sim e$). Поэтому обычно существенны лишь переходы, сопровождающиеся излучением или поглощением минимально возможного числа фотонов. При этом вероятности процессов можно рассчитывать по теории возмущений. В частности, для вероятности перехода (в единицу времени) между состояниями дискретного спектра системы частиц с излучением одного фотона имеем

$$d\omega_{\text{но}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{V}_{\text{int}} | i \rangle|^2 d\rho_f. \quad (\text{XIV. 3})$$

Здесь волновые функции (векторы состояний) начального и конечного состояний системы «частицы + фотоны» имеют вид

$$\begin{aligned} |i\rangle &= \Psi_i(\xi) |0\rangle_{\gamma}, & E_i &= \varepsilon_i, \\ |f\rangle &= \Psi_f(\xi) |1_{k\sigma}, 0, \dots\rangle_{\gamma}, & E_f &= \varepsilon_f + \hbar\omega_k, \end{aligned}$$

ξ — совокупность независимых координат частиц, $\Psi_{i,f}(\xi)$ и $\varepsilon_{i,f}$ — волновые функции и энергии соответствующих состояний системы частиц, $|0\rangle_{\gamma}$ и $|1_{k\sigma}, 0, \dots\rangle_{\gamma}$ — векторы состояний фотонной подсистемы, соответствующие вакуумному и однофотонному состояниям. Матричный элемент в (XIV.3) с учетом (XIV.1), (XIV.2) (и свойств операторов \hat{a} , \hat{a}^+)

²⁾ Описываемое классически (неквантованное) внешнее поле, как и кулоновское взаимодействие частиц, обычным образом включено в гамильтониан частиц. Заметим, что если система частиц находится во внешнем магнитном поле, так что $\mathbf{A} \neq 0$, то в (XIV.2) следует заменить $\hat{\mathbf{p}}$ на $\hat{\mathbf{p}} - (e_a/c)\mathbf{A}$.

принимает вид

$$\langle f | \hat{V}_{\text{int}} | i \rangle = - \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V} \right)^{1/2} \langle \Psi_f | \sum_a \left\{ \frac{e_a}{m_a c} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \hat{\mathbf{p}}_a + \right. \\ \left. + i(\mu_a/s_a) [\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \mathbf{k}] \hat{\mathbf{s}}_a \right\} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} | \Psi_i \rangle. \quad (\text{XIV. 4})$$

В дипольном приближении здесь можно заменить $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ на 1, пренебречь слагаемыми с магнитными моментами частиц и преобразовать³⁾ матричный элемент возмущения к виду

$$\langle f | \hat{V}_{\text{int}} | i \rangle = i \sqrt{2\pi\hbar\omega/V} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \mathbf{d}_{fi}, \quad (\text{XIV. 5})$$

где $\mathbf{d}_{fi} = \langle \Psi_f | \sum_a e_a \mathbf{r}_a | \Psi_i \rangle$ — матричный элемент дипольного момента системы частиц. Так как для каждой из двух независимых поляризаций фотона плотность конечных состояний

$$d\rho_f = \int \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f - \hbar\omega) \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{V\omega^2}{(2\pi)^3 \hbar c^3} d\Omega_n, \quad (\text{XIV. 6})$$

где $\hbar\omega = \varepsilon_i - \varepsilon_f$, $d\Omega_n$ — элемент телесного угла в направлении излучения фотона, $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$, то выражение (XIV. 3) принимает вид

$$d\omega_{\text{п}\sigma} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \mathbf{d}_{fi}|^2 d\Omega_n. \quad (\text{XIV. 7})$$

Суммирование по поляризациям фотона, выполняемое с помощью формулы⁴⁾

$$\sum_{\sigma=1,2} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^*)_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_k = \delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2}, \quad (\text{XIV. 8})$$

³⁾ Воспользовавшись при этом соотношением

$$\langle \Psi_f | \hat{\mathbf{p}}_a / m_a | \Psi_i \rangle = -i\omega \langle \Psi_f | \mathbf{r}_a | \Psi_i \rangle, \quad \hbar\omega = \varepsilon_i - \varepsilon_f.$$

Оно справедливо и для системы, находящейся в магнитном поле, когда $\hat{\mathbf{p}}_a$ следует заменить на $\hat{\mathbf{p}}_a - e_a \mathbf{A}(\mathbf{r}_a)/c$.

⁴⁾ При этом

$$\sum_{\sigma} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \mathbf{a}) (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{b}) = \mathbf{a} \mathbf{b} - (\mathbf{n} \mathbf{a}) (\mathbf{n} \mathbf{b}) = [\mathbf{a} \mathbf{n}] \cdot [\mathbf{b} \mathbf{n}].$$

дает угловое распределение излучаемого фотона:

$$d\omega_{\mathbf{n}} = \sum_{\sigma} d\omega_{\mathbf{n}\sigma} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{nd}_{fi}|^2 d\Omega_{\mathbf{n}}, \quad (\text{XIV. 9})$$

а последующее интегрирование по направлениям вылета его определяет вероятность излучения фотона для соответствующего перехода $i \rightarrow f$ в системе частиц в дипольном приближении

$$\omega \equiv \omega_{E1} = \int d\omega_{\mathbf{n}} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2. \quad (\text{XIV. 10})$$

Заметим, что взаимодействие (XIV.2), имеющее в дипольном приближении вид

$$\hat{V}_{\text{int}} \approx -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(0) \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}^2(0), \quad (\text{XIV. 11})$$

эквивалентно выбору более простого по форме взаимодействия⁵⁾

$$\hat{V}'_{\text{int}} = -\hat{\mathbf{d}} \hat{\mathcal{E}}_{\text{rad}}(0), \quad (\text{XIV. 12})$$

где $\hat{\mathbf{d}} = e\mathbf{r}$ — дипольный момент частицы, а

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{E}}_{\text{rad}}(0) &= -\frac{1}{c} \dot{\hat{\mathbf{A}}}_{\text{rad}}(0) = \frac{i}{c\hbar} [\hat{H}_{\text{rad}}^{(0)}, \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(0)] = \\ &= i \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sqrt{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}/V} \{ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} - \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \}. \end{aligned} \quad (\text{XIV. 13})$$

Из (XIV.12) непосредственно следует выражение (XIV.5) для матричного элемента возмущения, определяющего излучение фотона в дипольном приближении.

В задачах данной главы для волновых функций свободных частиц⁶⁾ $\Psi_{\mathbf{p}} = V^{-1/2} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$ используется нормировка на 1 в объеме V . При этом связь вероятности $d\omega$ какого-либо перехода (в единицу времени)

5) Такое изменение вида взаимодействия возникает в результате выполнения определенного унитарного преобразования. Подчеркнем, что (XIV.12) эквивалентно именно полному выражению (XIV.11) (а не только линейной по операторам \hat{a} , \hat{a}^+ его правой части!).

6) При этом возможные значения импульса, образующие дискретный набор, определяются условием ортогональности волновых функций, $\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$; число независимых состояний в элементе объема d^3p составляет $V d^3p / (2\pi\hbar)^3$.

с участием такой частицы с дифференциальным сечением соответствующего процесса определяется соотношением

$$d\sigma = dw/j = V dw/v, \quad (\text{XIV. 14})$$

где $j = \rho v$ — плотность потока, $\rho = 1/V$ — объемная плотность частиц, v — относительная скорость сталкивающихся частиц; для столкновений фотонов с частицей (атомом) $v = c$.

§ 1. Излучение фотонов

14.1. Найти *время жизни* и *ширину* возбужденного $2p$ -состояния атома водорода.

Применить полученный результат к μ -мезоатому и сравнить со временем жизни свободного мюона $\tau_\mu = 2,2 \cdot 10^{-6}$ с.

14.2. Найти время жизни первого возбужденного уровня заряженного сферического осциллятора.

14.3. Найти вероятность электромагнитного перехода (в единицу времени⁷) для сферического ротатора, находящегося на первом возбужденном уровне; ротатор имеет момент инерции I и дипольный момент \mathbf{d} , направленный вдоль его оси.

14.4. Найти вероятность электромагнитного перехода между вращательными уровнями двухатомной молекулы (без изменения электронного и колебательного состояний), имеющей дипольный момент d_0 . Электронный терм молекулы ${}^1\Sigma$. Ограничиться случаем первого возбужденного ротационного уровня.

Произвести оценку вероятности перехода и сравнить ее с вероятностью дипольного перехода для атомов.

14.5. Показать, что дипольные переходы между
а) уровнями атома с различной мультиплетностью (например, между состояниями орто- и парагелия),
б) компонентами тонкой структуры одного и того же терма атома (т. е. между различными подуровнями одного и того же мультиплета с данными значениями L и S) *запрещены*.

14.6. Для $2s_{1/2}$ -состояния атома водорода найти вероятность электромагнитного перехода в $2p_{1/2}$ -состояние. Полученный результат сравнить с вероят-

⁷) В ряде последующих задач эта оговорка для краткости опускается.

ностью перехода $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ с излучением двух фотонов $\omega_{2\gamma} \approx 8 \text{ с}^{-1}$ и с результатом 14.8. Напомним, что разность энергий $2s_{1/2}$ - и $2p_{1/2}$ -уровней (так называемый *лэмбовский сдвиг*) составляет $\Delta E_{LS} \approx \approx 1058 \text{ МГц} \approx 4,4 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$.

14.7. Свободная нейтральная частица со спином $s = 1/2$, имеющая магнитный момент μ (так что $\hat{\mu} = \mu \hat{\sigma}$), находится в однородном магнитном поле \mathcal{H}_0 в состоянии с определенным значением проекции спина на направление поля. Найти вероятность излучения фотона в единицу времени в результате *переворота* спина.

14.8. Оценить вероятность однофотонного перехода атома водорода из возбужденного $2s_{1/2}$ -состояния в основное $1s_{1/2}$ -состояние. Сравнить полученное значение с результатом 14.6. Какова мультипольность перехода?

14.9. Найти вероятность электромагнитного перехода между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода⁸⁾ (см. 11.2).

14.10. Какова мультипольность излучения для доминирующих электромагнитных переходов между компонентами тонкой структуры одного и того же терма атома? Оценить численное значение вероятности соответствующих переходов в единицу времени.

14.11. Для частицы в поле $U(\mathbf{r})$ доказать справедливость следующих соотношений (так называемых «*правил сумм*», сравнить с 6.13):

$$a) \sum_m |\langle m | x | n \rangle|^2 = \langle n | x^2 | n \rangle;$$

$$б) \sum_m \omega_{mn} |\langle m | x | n \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2\mu};$$

$$в) \sum_m \omega_{mn}^2 |\langle m | x | n \rangle|^2 = \frac{1}{\mu^2} \langle n | \hat{p}_x^2 | n \rangle;$$

$$г) \sum_m \omega_{mn}^3 |\langle m | x | n \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2\mu^2} \langle n | \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} | n \rangle.$$

⁸⁾ Отметим, что излучение, связанное с рассматриваемым переходом (относящееся к радиодиапазону, длина волны 21 см), играет важную роль в астрофизических исследованиях; так, по *красному смещению* спектральной линии определяют расстояния до (удаляющихся) галактик.

Здесь μ — масса частицы, суммирование проводится по всем стационарным состояниям частицы, $|n\rangle$ — стационарное состояние дискретного спектра, $\langle n|n\rangle = 1$.

§ 2. Рассеяние фотонов.

Излучение фотонов при столкновениях

14.12. Найти дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния фотонов свободной заряженной частицей. Сравнить с результатом классической электродинамики.

14.13. Найти дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния фотонов сферическим ротатором, имеющим момент инерции I и электрический дипольный момент \mathbf{d} (направленный вдоль оси ротатора) и находящимся в основном состоянии, см. также следующую задачу.

14.14. В условиях предыдущей задачи найти дифференциальное и полное сечения неупругого рассеяния фотона ротатором. Какие состояния ротатора при этом возбуждаются?

14.15. Найти дифференциальное и полное сечения рассеяния фотонов заряженным сферическим осциллятором, находящимся в основном состоянии.

14.16. Найти дифференциальное и полное сечения рассеяния фотонов нейтральной частицей со спином $s = 1/2$, имеющей магнитный момент μ . Рассмотреть следующие случаи:

1) до рассеяния частица находится в состоянии с определенным значением проекции спина $s_z = +1/2$ на ось z и в процессе рассеяния спиновое состояние частицы не изменяется (ось z направлена вдоль импульса падающих фотонов);

2) в процессе столкновения происходит *переворот* спина, т. е. в конечном состоянии уже $s_z = -1/2$;

3) спиновое состояние частицы после столкновения не детектируется.

Обобщить полученные результаты на случай частицы с произвольным значением спина.

14.17. Выразить сечение рассеяния фотона малой частоты, $\hbar\omega \rightarrow 0$, атомом, находящимся в стационарном состоянии с равным нулю моментом, через поляризуемость β_0 атома (определяющую сдвиг уровня, $\Delta E = -\beta_0 \mathcal{E}^2/2$, в однородном электрическом поле).

14.18. Найти сечение *фотоэффекта* для водородоподобного атома, находящегося в основном состоянии. Предполагается, что частота фотона удовлетворяет условию $\hbar\omega \gg I$, где I — потенциал ионизации атома.

14.19. Найти сечение *радиационной рекомбинации* быстрого электрона с покоящимся протоном (процесс, обратный фотоэффекту) с образованием атома водорода в основном состоянии.

14.20. Найти дифференциальное и полное сечения фоторасщепления дейтрона, т. е. процесса $\gamma + d \rightarrow p + n$.

Указание. Волновую функцию дейтрона взять в приближении потенциала нулевого радиуса, а в конечном состоянии протон и нейтрон рассматривать как свободные.

14.21. Найти дифференциальное сечение *тормозного излучения* электрона в кулоновском поле ядра. Исследовать угловое и спектральное распределения излучаемых фотонов. Взаимодействие электрона с ядром рассматривать как возмущение.

Г л а в а 15

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ВОЛНОВЫЕ УРАВНЕНИЯ

Характерная особенность физических явлений в релятивистской области состоит в возможности взаимного превращения (рождения и аннигиляции) частиц при их взаимодействии. Поэтому постановка задачи о свойствах состояний одночастичной системы во внешнем поле имеет ограниченную область применимости, а обычная квантовомеханическая интерпретация волновой функции частицы в координатном представлении как амплитуды вероятности оказывается несостоятельной¹⁾. Для обеспечения релятивистской инвариантности теории описание одночастичных состояний связано с использованием волновых функций, обладающих определенными *трансформацион-*

¹⁾ Действительно, из соотношения неопределенности $\Delta p \Delta x \geq \hbar$ следует, что локализация частицы в малой области пространства, $\Delta x \leq \hbar/mc$, сопровождается передачей большой энергии частице (требует сильных внешних полей). При этом становятся возможными процессы рождения новых частиц и одночастичная задача теряет смысл.

ными свойствами относительно преобразования Лоренца. Эти свойства, как и вид соответствующего волнового уравнения, зависят от значения спина частицы.

В случае бесспиновой частицы волновая функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ — однокомпонентная величина — является *четырёхмерным скаляром*²⁾. Релятивистское волновое уравнение для такой свободной частицы, уравнение Клейна — Гордона, имеет вид

$$(\hat{p}_i^2 + m^2 c^2) \Psi = 0, \quad \text{или} \quad \left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \Psi = \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \Psi. \quad (\text{XV. 1})$$

Волновое уравнение для заряженной бесспиновой частицы, находящейся во внешнем электромагнитном поле, описываемом потенциалами \mathbf{A} , φ , получается из (XV. 1) заменами $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c$, $i\hbar(\partial/\partial t) \rightarrow i\hbar(\partial/\partial t) - e\varphi$ и имеет вид

$$\frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right)^2 \Psi = \left[\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^2 \right] \Psi. \quad (\text{XV. 2})$$

Из этих уравнений следует уравнение непрерывности

$$\partial \rho / \partial t + \text{div } \mathbf{j} = 0,$$

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \frac{2ie}{\hbar} \varphi \Psi^* \Psi \right), \quad (\text{XV. 3})$$

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^* - \frac{2ie}{\hbar} \mathbf{A} \Psi^* \Psi \right)$$

и сохранение во времени величины $Q = \int \rho(\mathbf{r}, t) dV$.

Хотя эти соотношения внешне подобны существующим в нерелятивистской квантовой механике (и играющим важную роль в интерпретации теории), существенное отличие состоит в том, что теперь ρ не является положительно определенной величиной и не может рассматриваться как плотность вероятности. Однако в связи с отмеченным выше ограничением на область локализации одночастичного состояния возможность введения плотности вероятности

²⁾ При этом по отношению к преобразованиям лишь пространственных координат, включающим и отражение, волновые функции могут быть как *скалярными*, так и *псевдоскалярными*. Эти две возможности отвечают частицам с различными внутренними четностями, см. 15.5.

координат $\rho \geq 0$ не является необходимым элементом релятивистской квантовой теории. Некоторые вопросы, связанные с интерпретацией решений уравнения Клейна — Гордона и свойства состояний бесспиновой частицы во внешних полях, рассмотрены в задачах § 1 данной главы.

Для свободной частицы со спином $s = 1/2$ релятивистское волновое уравнение, *уравнение Дирака*, имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}\Psi \equiv (c\hat{\alpha}\hat{\mathbf{p}} + mc^2\beta) \Psi, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (\text{XV. 4})$$

При этом волновая функция Ψ частицы является четырехкомпонентной величиной³⁾ — *биспинором*; матрицы Дирака

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix}, \quad (\text{XV. 5})$$

$$\gamma = -i\beta\alpha = i \begin{pmatrix} 0 & -\sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 = - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

где σ , 1 , 0 означают двухрядные матрицы Паули, единичную и нулевую (символ оператора над матрицами опущен).

Для электрона во внешнем электромагнитном поле с потенциалами \mathbf{A} , $\varphi \equiv A_0$ уравнение Дирака получается из (XV.4) с помощью указанных выше замен (заряд электрона обозначен как $-e < 0$):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(c\hat{\alpha} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + mc^2\beta - eA_0 \right) \Psi. \quad (\text{XV. 6})$$

Отсюда следует наличие у электрона спинового магнитного момента, причем для него гиромагнитное

³⁾ Удвоение, по сравнению с нерелятивистским случаем, числа компонент в. ф. отражает то общее обстоятельство, что интерпретация решений релятивистских волновых уравнений приводит к концепции *античастицы*. В случае бесспиновых частиц появление «дополнительных» решений, соответствующих античастице, связано с тем, что уравнение Клейна — Гордона, в отличие от уравнения Дирака, содержит вторые производные по времени.

отношение⁴⁾ равно $-e/mc$ в согласии с экспериментальным значением.

Из (XV.4) и (XV.6) следует уравнение непрерывности

$$\partial\rho/\partial t + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad \rho = \Psi^* \Psi, \quad \mathbf{j} = c\Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi. \quad (\text{XV.7})$$

§ 1. Уравнение Клейна — Гордона

15.1. Показать, что если $\Psi^\pm(\mathbf{r}, t)$ представляет волновой пакет, составленный из частных решений уравнения Клейна — Гордона, отвечающих энергии (или частоте) определенного знака (либо $\epsilon \geq mc^2$, либо $\epsilon \leq -mc^2$), то независимо от конкретного вида такой суперпозиции значение сохраняющейся во времени величины

$$Q^\pm = \int \rho^\pm(\mathbf{r}, t) dV = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi^{(\pm)*} \frac{\partial \Psi^\pm}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^{(\pm)*}}{\partial t} \Psi^\pm \right\} dV$$

является *знакоопределенным*.

15.2. Показать, что уравнение Клейна — Гордона для свободной частицы инвариантно относительно *антилинейного* преобразования волновой функции вида

$$\Psi \rightarrow \Psi_c(\mathbf{r}, t) = \hat{C}\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi^*(\mathbf{r}, t).$$

Преобразование \hat{C} описывает *зарядовое сопряжение*. Оно позволяет поставить в соответствие не имеющим непосредственного физического смысла решениям $\Psi^-(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона (Ψ^- — суперпозиция частных решений, отвечающих формально отрицательной энергии частицы, см. 15.1) функцию $\Psi_c^+ = \hat{C}\Psi^-$, отвечающую уже положительным энергиям и интерпретируемую как волновая функция *античастицы*.

Убедиться в том, что если функция Ψ является собственной функцией какого-либо из операторов $\hat{\epsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\hat{\mathbf{p}}$, \hat{l}_z , \hat{l}^2 , то соответствующая *зарядово сопряженная* функция Ψ_c также является собственной

⁴⁾ Этот результат, как и уравнение (XV.6), справедлив лишь для частиц со спином 1/2, не обладающих *сильным* взаимодействием.

функцией. Как связаны собственные значения указанных операторов для таких функций?

15.3. а) Какой вид принимает уравнение Клейна — Гордона для заряженной бесспиновой частицы во внешнем электромагнитном поле при преобразовании волновой функции

$$\Psi \rightarrow \Psi_c(\mathbf{r}, t) = \hat{C}\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi^*(\mathbf{r}, t)?$$

б) Какое преобразование электромагнитного поля следует осуществить одновременно с указанным преобразованием функции $\Psi(\mathbf{r}, t)$, чтобы получающееся при этом уравнение имело такой же вид, как и исходное?

в) На основании полученных результатов дать интерпретацию преобразования \hat{C} как преобразования зарядового сопряжения, осуществляющего переход от частицы к античастице (сравнить с 15.2).

15.4. Показать, что внешнее *скалярное* (по отношению к преобразованию Лоренца) поле оказывает одинаковое действие на бесспиновую частицу и соответствующую ей античастицу. Сравнить со случаем частицы во внешнем электромагнитном поле (см. 15.3).

Указание. Уравнение, описывающее бесспиновую частицу во внешнем скалярном поле $U(\mathbf{r}, t)$, имеет вид

$$\{c^2\hat{\mathbf{p}}^2 + m^2c^4 + 2mc^2U\} \Psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi.$$

Не следует путать скалярное поле с электростатическим (последнее представляет временную компоненту 4-вектора). В нерелятивистском пределе $U(\mathbf{r}, t)$ имеет смысл обычной потенциальной энергии.

15.5. Показать, что *внутренние* четности бесспиновой частицы и соответствующей ей античастицы — одинаковые.

15.6. Основываясь на сохранении величины Q (см. 15.1), обсудить вопрос об ортогональности и нормировке функций $\Psi_{p, e}(\mathbf{r}, t)$, являющихся решениями уравнения Клейна — Гордона, отвечающими определенным значениям энергии (обоих знаков) и импульса.

15.7. Показать, что для бесспиновой частицы в релятивистском случае можно сохранить обычную интерпретацию волновой функции в импульсном пред-

ставлении как амплитуды вероятности значений импульса (в отличие от координатного представления, см. 15.1).

Какова связь волновых функций частицы и античастицы в импульсном представлении с решениями $\Psi^\pm(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона? Обсудить вопрос о собственных функциях оператора координат частицы.

Сравнить с нерелятивистским случаем.

15.8. Получить выражение для среднего значения энергии свободной бесспиновой частицы в произвольном состоянии, описываемом решением $\Psi^+(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона.

15.9. То же, что и в предыдущей задаче, но для среднего значения импульса частицы.

15.10. То же, что и в предыдущих двух задачах, но для среднего значения момента частицы.

15.11. Найти в релятивистском случае энергетический спектр заряженной бесспиновой частицы, находящейся в однородном магнитном поле.

Сравнить с нерелятивистским случаем.

15.12. Найти энергетический спектр s -состояний бесспиновой частицы во внешнем скалярном поле (см. 15.4) вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

Каков энергетический спектр античастицы в таком поле?

Обсудить трудности в интерпретации энергетического спектра, возникающие при значительном углублении ямы.

15.13. Найти энергетические уровни дискретного спектра заряженной бесспиновой частицы (заряд $-e$) в кулоновском поле ядра с зарядом Ze (ядро считать точечным и бесконечно тяжелым).

В случае $Z\alpha \ll 1$ ($\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$) сравнить полученный результат с соответствующим выражением нерелятивистской теории.

Обратить внимание на трудности, возникающие в интерпретации энергетического спектра при достаточно больших значениях заряда ядра, и объяснить их причину.

15.14. Показать, что для состояний свободной частицы уравнение Клейна — Гордона можно записать

в виде уравнения Шрёдингера, $i\hbar \partial\Psi/\partial t = \hat{H}_{\text{rel}}\Psi$. Найти соответствующий гамильтониан и обсудить его нерелятивистский предел. Какова связь шрёдингеровской волновой функции Ψ с решением Ψ^+ (см. 15.1 и 15.7) уравнения Клейна — Гордона?

15.15. Исходя из стационарного уравнения Клейна — Гордона для заряженной бесспиновой частицы, находящейся в постоянном электромагнитном поле:

а) получить в нерелятивистском пределе уравнение Шрёдингера;

б) найти первые две ($\sim 1/c^2$ и $\sim 1/c^4$) релятивистские поправки к гамильтониану частицы.

Показать, что поправка $\sim 1/c^4$ включает слагаемые, отличающиеся от разложения гамильтониана

$$\hat{H}_{\text{rel}} = \sqrt{c^2 (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2 + m^2 c^4} + e\varphi - mc^2.$$

15.16. Показать, что в достаточно сильном электростатическом поле заряженная бесспиновая частица испытывает притяжение (в квантовомеханическом смысле) независимо от знака ее заряда⁵).

15.17. Найти в борновском приближении амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния релятивистской заряженной (заряд e_1) бесспиновой частицы в кулоновском поле ядра с зарядом Ze (ядро считать бесконечно тяжелым).

Сравнить со случаем нерелятивистской частицы.

Указать условия применимости полученных результатов.

15.18. Найти в борновском приближении энергетическую зависимость сечения рассеяния $\sigma(\epsilon)$ заряженной бесспиновой частицы во внешнем электростатическом поле $\varphi(r)$ при $\epsilon \rightarrow \infty$.

Указать условия применимости полученного результата; сравнить его с результатом нерелятивистской теории.

15.19. Найти в борновском приближении энергетическую зависимость сечения рассеяния $\sigma(\epsilon)$ бесспиновой частицы во внешнем скалярном поле $U(r)$ (см. указание к 15.4) при $\epsilon \rightarrow \infty$.

Указать условия применимости полученного результата; сравнить его с результатами нерелятивистской теории и предыдущей задачи.

⁵) Это утверждение справедливо и для частиц с отличным от нуля спином.

§ 2. Уравнение Дирака

15.20. Выяснить, какие из указанных ниже операторов коммутируют с гамильтонианом свободной релятивистской частицы со спином $s = 1/2$ (и тем самым являются интегралами движения):

- 1) $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$; 2) $\hat{\mathbf{I}} = \frac{1}{\hbar} [\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}] = -i[\mathbf{r}\nabla]$; 3) \hat{I}^2 ;
 4) $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}$; 5) $\hat{\mathbf{s}}^2$; 6) $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{s}}$; 7) $\hat{\mathbf{j}}^2$; 8) $\hat{\Lambda} = \hat{\mathbf{p}}\boldsymbol{\Sigma}$;
 9) $\hat{I}[\hat{I}\Psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi(-\mathbf{r})]$; 10) $\hat{P} \equiv \beta\hat{I}$; 11) γ_5 .

Сравнить со случаем свободной нерелятивистской частицы.

15.21. Найти решения уравнения Дирака, описывающие свободную частицу, имеющую определенные импульс и энергию.

Для конкретизации спинового состояния частицы воспользоваться коммутативностью оператора $\hat{\Lambda} = \boldsymbol{\Sigma}\hat{\mathbf{p}}$ с операторами $\hat{\mathbf{p}}$ и \hat{H} (см. также 15.26).

15.22. Найти компоненты 4-вектора плотности тока свободной дираковской частицы в состоянии, характеризующемся определенным значением ее импульса.

Сравнить с соответствующими выражениями нерелятивистской теории.

15.23. Найти среднее значение вектора спина дираковской частицы, имеющей определенный импульс (при этом спиновое состояние частицы — произвольное). Считать для простоты, что импульс направлен вдоль оси z .

Сравнить с результатом нерелятивистской теории.

15.24. Рассмотреть унитарное преобразование биспиноров, задаваемое унитарным оператором (матрицей)

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Какой вид имеют в новом представлении оператор спина частицы и уравнение Дирака для двухкомпонентных спиноров $(\Psi' = \hat{U}\Psi \equiv \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix})$? Обсудить случай безмассовой частицы, $m = 0$.

15.25. Считая известным спиновое состояние в системе покоя частицы, найти биспинор $u(\mathbf{p})$ в произ-

вольной системе координат, в которой частица имеет импульс \mathbf{p} .

Используя полученный результат, найти связь средних значений вектора спина частицы в указанных системах координат.

15.26. Как известно (см. 15.21), для частицы со спином $s = 1/2$ волновая функция состояния с импульсом \mathbf{p} и энергией $\varepsilon = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$ имеет вид

$$\Psi_{\mathbf{p}}^+ = u(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)}; \quad u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2}\varphi \end{pmatrix}.$$

Указанное состояние является двукратно вырожденным (существует два независимых способа выбора спинора φ), что связано со спиновой степенью свободы. Рассмотрим два таких независимых состояния, соответствующие выбору спинора φ в виде φ_{λ} , где

$$(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{n})\varphi_{\lambda} = \lambda\varphi_{\lambda},$$

$\tilde{\mathbf{n}}$ — произвольный единичный вектор, $\lambda = \pm 1$, см. 5.12.

Убедитесь в ортогональности спиновых состояний релятивистской частицы, отвечающих различным значениям λ .

Учитывая результат предыдущей задачи, выяснить физический смысл вектора \mathbf{n} и соответствующих собственных значений λ .

Каков смысл вектора $\frac{1}{2}\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi$ при нормировке $\varphi^*\varphi = 1$?

15.27. Выполнив преобразование зарядового сопряжения, найти явный вид волновой функции Ψ_c^+ состояния античастицы, соответствующего решению уравнения Дирака Ψ^- с определенным импульсом, равным $-\mathbf{p}$, и отрицательной энергией $\varepsilon = -\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$ частицы. Сравнить с волновой функцией физического состояния частицы (с энергией $\varepsilon \geq mc^2$ и определенным импульсом), см. 15.21 и 15.26.

Как изменяется квантовое число *спиральность* при зарядовом сопряжении (сравнить с 15.2)?

15.28. Показать, что для дираковской частицы с массой $m = 0$ оператор (матрица) γ_5 коммутирует с гамильтонианом свободной частицы.

Найти собственные значения указанного оператора и выяснить их физический смысл.

15.29. Показать, что операторы (матрицы) $\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5)$ являются проекционными.

Для дираковской частицы с массой $m = 0$ эти операторы коммутируют с гамильтонианом. На какие состояния частицы и античастицы проектируют указанные операторы \hat{P}_{\pm} ?

15.30. Квантовомеханическое описание фотона может быть осуществлено с помощью двух векторов $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$, удовлетворяющих⁶⁾ таким же уравнениям, как уравнения Максвелла классической электродинамики для свободного электромагнитного поля $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$ (т. е. для электромагнитных волн в вакууме).

Показать, что эти уравнения можно представить в виде, аналогичном уравнениям Дирака для двухкомпонентных спиноров (следует учесть, что масса фотона $m = 0$, а его спин $s = 1$).

15.31. Найти нерелятивистский предел (с точностью до членов порядка « $1/c$ » включительно) выражений для плотности заряда и тока дираковской частицы, находящейся во внешнем электромагнитном поле.

15.32. Гамильтониан частицы со спином $s = 1/2$, находящейся во внешнем электромагнитном поле, имеет вид

$$\hat{H} = c\alpha\hat{p} + mc^2\beta + \frac{i\kappa}{2} F_{\mu\nu}\beta\gamma_{\mu}\gamma_{\nu},$$

где κ — некоторый параметр, характеризующий частицу, $F_{\mu\nu}$ — тензор электромагнитного поля.

Рассмотрев нерелятивистский предел (с точностью до членов порядка « $1/c$ » включительно) волнового уравнения⁷⁾ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi$, выяснить физический

⁶⁾ Подчеркнем, что \mathcal{E} , \mathcal{H} , как и векторный потенциал \mathbf{A} , при этом являются комплексными величинами в отличие от вещественности соответствующих функций, используемых для описания классического электромагнитного поля.

⁷⁾ Это уравнение можно записать в явно релятивистски инвариантном виде:

$$\left(ic\beta + \frac{i\kappa}{2} F_{\mu\nu}\gamma_{\mu}\gamma_{\nu} + mc^2 \right) \Psi = 0 \quad \left(\beta \equiv \hat{\mathbf{p}}_{\mu}\hat{\gamma}_{\mu} = \beta\gamma - \frac{\hbar}{c}\gamma_4\frac{\partial}{\partial t} \right).$$

смысл параметра κ , т. е. установить его связь с электромагнитными характеристиками частицы. Сравнить со случаем заряженных дираковских частиц — электрона и мюона, гамильтониан которых имеет вид

$$\hat{H} = c\alpha \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + mc^2\beta + eA_0.$$

15.33. Найти энергетический спектр заряженной дираковской частицы в однородном магнитном поле.

15.34. Найти в первом порядке теории возмущений дифференциальное сечение рассеяния дираковской частицы в кулоновском поле ядра с зарядом Ze . Ядро считать бесконечно тяжелым.

Указание. Воспользоваться теорией возмущений для переходов в непрерывном спектре под действием стационарного возмущения; см. также 15.37.

15.35. Найти в первом порядке теории возмущений энергетическую зависимость сечения рассеяния $\sigma(\epsilon)$ заряженной дираковской частицы во внешнем электростатическом поле $A_0(r)$ при $\epsilon \rightarrow \infty$.

Сравнить с результатом 15.18.

15.36. Найти функции Грина $\hat{G}_{\epsilon; \alpha\beta}^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ стационарного уравнения Дирака для свободной частицы при энергии $\epsilon \geq mc^2$, удовлетворяющие уравнению

$$(\hat{H} - \epsilon)\hat{G}_{\epsilon} \equiv (-i\hbar c\alpha\nabla + mc^2\beta - \epsilon)\hat{G}_{\epsilon} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

и имеющие при $r \rightarrow \infty$ асимптотики вида

$$G_{\epsilon}^{\pm} \propto \frac{1}{r} e^{\pm ikr}, \quad k = \sqrt{\frac{\epsilon^2 - m^2c^4}{\hbar^2c^2}}.$$

Найти также функции Грина \hat{f}_{ϵ}^{\pm} уравнения Дирака, записанного в симметричной форме:

$$(i\hat{c}\hat{\rho} + mc^2)\Psi_{\epsilon} = 0, \quad \hat{\rho} \equiv -i\hbar\nabla + \frac{i\epsilon}{c}\gamma_4.$$

15.37. Найти в борновском приближении амплитуду рассеяния дираковской частицы во внешнем постоянном электромагнитном поле.

Применить полученный результат к случаю электростатического поля $A_0 = Ze/r$ и сравнить с 15.34.

РЕШЕНИЯ

Глава I

ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

1.1. Все операторы кроме \hat{K} линейные.

Вид оператора \hat{T}_a^+ следует из цепочки равенств

$$\begin{aligned}\int \Psi^*(x) \hat{T}_a \Phi(x) dx &\equiv \int \Psi^*(x) \Phi(x+a) dx = \\ &= \int \Psi^*(x-a) \Phi(x) dx \equiv \int (\hat{T}_a^+ \Psi(x))^* \Phi(x) dx\end{aligned}$$

(интегрирование проводится в бесконечных пределах; при преобразованиях использована соответствующая замена переменной интегрирования). Отсюда $\hat{T}_a^+ \Psi(x) = \Psi(x-a) = \hat{T}_{-a} \Psi(x)$, так что $\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$.

Аналогично находим: $\hat{I}^+ = \hat{I}$, $\hat{M}_c^+ = \hat{M}_{1/c}$, $\hat{P}_{12}^+ = \hat{P}_{12}$.

Так как оператор \hat{K} нелинейный, то понятие оператора \hat{K}^+ к нему неприменимо (такой оператор не существует).

Все приведенные операторы имеют обратные:

$$\hat{I}^{-1} = \hat{I}, \quad \hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a}, \quad \hat{M}_c^{-1} = \hat{M}_{1/c}, \quad \hat{K}^{-1} = \hat{K}, \quad \hat{P}_{12}^{-1} = \hat{P}_{12}.$$

1.2. При доказательстве следует учесть соотношения $(\hat{L}^+)^+ = \hat{L}$ и $(\hat{F}\hat{L})^+ = \hat{L}^+\hat{F}^+$.

1.3. $A = (L + L^+)/2$, $B = (L - L^+)/2i$.

1.4. $[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = [A, B]C + B[A, C]$. Аналогично: $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$.

1.5. Нет, не могут. Взяв следы матриц в обеих частях равенства $\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P} = -i\hbar\hat{I}$ и учтя, что $\text{Sp}(\hat{P}\hat{Q}) = \text{Sp}(\hat{Q}\hat{P})$, $\text{Sp}\hat{I} = N$ (N — ранг матрицы), приходим к противоречию¹⁾.

¹⁾ В случае $N = \infty$ противоречия не возникает ввиду того, что $\text{Sp}(\hat{P}\hat{Q}) = \infty$.

1.6. Записав $(\hat{A} - \lambda \hat{B})^{-1} = \sum_n \lambda^n \hat{C}_n$, умножим обе части равенства слева на $(\hat{A} - \lambda \hat{B})$. Приравнявая в получающемся соотношении члены при одинаковых степенях λ , находим

$$\hat{A} \hat{C}_{n+1} = \hat{B} \hat{C}_n, \quad \hat{C}_{n+1} = \hat{A}^{-1} \hat{B} \hat{C}_n, \quad \hat{C}_0 = \hat{A}^{-1},$$

так что искомое разложение имеет вид

$$(\hat{A} - \lambda \hat{B})^{-1} = \hat{A}^{-1} + \lambda \hat{A}^{-1} \hat{B} \hat{A}^{-1} + \dots = \hat{A}^{-1} \sum_n \lambda^n (\hat{B} \hat{A}^{-1})^n.$$

1.7. 1) Разложив экспоненту в ряд и учтя, что $I^2 = 1$, находим $\exp(ia\hat{I}) = \cos a + i(\sin a)\hat{I}$.

2) Представив оператор в виде ряда, получаем

$$e^{ad/dx} \Psi(x) = \sum_n \frac{a^n}{n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^n \Psi(x) \equiv \sum_n \frac{a^n}{n!} \Psi^{(n)}(x) = \Psi(x+a).$$

Последнее равенство в этих соотношениях определяет разложение функции в ряд Тейлора. Таким образом, оператор $\exp(ad/dx)$ является оператором сдвига.

3) Рассмотрим действие оператора

$$\hat{L}_a \equiv \sum_n (1/n!) (ax d/dx)^n$$

на одночлен x^k . Так как $(xd/dx)x^k = kx^k$, то $(ax d/dx)^n x^k = (ak)^n x^k$ и соответственно $\hat{L}_a x^k = (e^a x)^k$. Воспользовавшись разложением функции $\Psi(x)$ в ряд Тейлора, получаем

$$\hat{L}_a \Psi(x) = \hat{L}_a \sum_k \frac{c_k}{k!} x^k = \sum_k \frac{c_k}{k!} (e^a x)^k = \Psi(e^a x),$$

так что рассматриваемый оператор с точностью до множителя \sqrt{c} совпадает с оператором изменения масштаба M_c , введенным в задаче 1.1; при этом $c = e^a$.

1.8. Перейдем к новой переменной $y = y(x)$ согласно соотношению

$$y = \int_b^x g^{-1}(x) dx. \quad \text{При этом } \hat{T}(g(x)) = \exp(d/dy), \text{ так}$$

что рассматриваемый оператор является оператором сдвига на $\Delta y = 1$ вдоль «оси» y (см. 1.7), и поэтому

$$\hat{T}(g(x)) \Psi(x) = \exp(d/dy) \Psi(x(y)) = \Psi(x(y+1)),$$

где $x(y)$ — обратная функция по отношению к $y(x)$.

В частных случаях имеем:

а) $y = (1/a) \ln x$, так что $x = e^{ay}$ и $x(y+1) = e^ax$; соответственно $T(ax)\Psi(x) = \Psi(e^ax)$ (сравнить с 1.7).

б) $x = ay^{1/3}$ и $T(a^3/3x^2)\Psi(x) = \Psi((x^3 + a^3)^{1/3})$.

1.9. Для доказательства следует разложить экспоненту в ряд и после дифференцирования и взятия следа сравнить члены с одинаковыми степенями λ . При этом, если операторы \hat{A} и \hat{B} не коммутируют, взятие следа является необходимым для справедливости рассматриваемого соотношения.

1.10. Введем оператор $\exp[\lambda(\hat{A} + \hat{B})]$ и запишем его в виде

$$\exp[\lambda(\hat{A} + \hat{B})] = \exp(\lambda\hat{A}) \exp(\lambda\hat{B}) \exp(-i\lambda^2 c/2) \hat{G}(\lambda), \quad (1)$$

где \hat{G} подлежит определению. Продифференцировав обе части (1) по λ и воспользовавшись соотношением

$$\exp(\lambda\hat{A}) \hat{B} = (\hat{B} + i\lambda c) \exp(\lambda\hat{A})$$

(его легко установить, если разложить $\exp(\lambda\hat{A})$ в ряд и учесть, что $[\hat{A}, \hat{B}] = ic$), находим $d\hat{G}/d\lambda = 0$, т. е. \hat{G} от λ не зависит. Положив $\lambda = 0$ в (1), получаем $\hat{G} \equiv 1$ и из (1) же при $\lambda = 1$ вытекает утверждение задачи.

1.11. $L^+(\xi, \xi') = L^*(\xi', \xi)$.

Записав действие оператора \hat{M}_c на функцию $\Psi(x)$ в виде

$$\hat{M}_c \Psi(x) = \sqrt{c} \Psi(cx) = \sqrt{c} \int \delta(cx - x') \Psi(x') dx',$$

находим его ядро $M_c(x, x') = \sqrt{c} \delta(cx - x')$. Аналогично получаем

$$\begin{aligned} I(x, x') &= \delta(x + x'); & T_a(x, x') &= \delta(x - x' + a); \\ X(x, x') &= x\delta(x - x'); & P(x, x') &= -i\hbar \partial\delta(x - x')/\partial x. \end{aligned}$$

1.12. а) Имея в виду, что ядро оператора $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ равно

$$C(x, x') = \int A(x, x'') B(x'', x') dx'',$$

и учитывая вид ядра $X(x, x') = x\delta(x - x')$ оператора \hat{x} , из условия $\hat{L}\hat{x} - \hat{x}\hat{L} = 0$ находим

$$(x' - x) L(x, x') = 0, \quad \text{так что} \quad L(x, x') = f(x) \delta(x - x'), \quad (1)$$

где $f(x)$ — произвольная функция.

б) Аналогично, из условия $\hat{L}\hat{p} - \hat{p}\hat{L} = 0$ и вида ядра $P(x, x') = -i\hbar \partial\delta(x - x')/\partial x$ следует

$$(\partial/\partial x + \partial/\partial x') L(x, x') = 0, \quad \text{так что} \quad L(x, x') = g(x - x'), \quad (2)$$

где $g(x)$ — также произвольная функция.

е) Соотношения (1) и (2) одновременно могут иметь место лишь при условии $f(x) = L_0 = \text{const}$; при этом $L(x, x') = L_0 \delta(x - x')$. Оператор с таким ядром имеет вид $\hat{L} \equiv L_0$.

1.13. Нормировка в. ф. на единицу дает $|C| = (\pi a^2)^{-1/4}$; при этом $dw(x) = |\Psi(x)|^2 dx$. По формуле (1.5) для средних находим:

$$\bar{x} = x_0, \quad \overline{x^2} = a^2/2 + x_0^2, \quad \overline{(\Delta x)^2} = a^2/2,$$

$$\bar{p} = p_0, \quad \overline{p^2} = p_0^2 + \hbar^2/2a^2, \quad \overline{(\Delta p)^2} = \hbar^2/2a^2.$$

1.14. а) $\bar{x}_2 = \bar{x}_1 - a$, $\bar{p}_2 = \bar{p}_1$; б) $\bar{x}_2 = \bar{x}_1$, $\bar{p}_2 = \bar{p}_1 + p_0$, где индексы 1, 2 соответствуют средним значениям в состояниях с волновыми функциями $\Psi_{1,2}(x)$.

$$1.15. \quad \overline{\hat{L}\hat{L}^+} = \int \Psi^* \hat{L}\hat{L}^+ \Psi d\tau = \int (\hat{L}^+ \Psi)^* (\hat{L}^+ \Psi) d\tau \geq 0.$$

1.16. Среднее значение дипольного момента системы

$$\bar{d} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(r_1, \dots, r_n) \sum_a e_a r_a \Psi(r_1, \dots, r_n) \prod_b d^3 r_b. \quad (1)$$

Сделав замену переменных $r'_a = -r_a$, имеем

$$\bar{d} = - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(-r'_1, \dots, -r'_n) \times$$

$$\times \sum_a e_a r'_a \Psi(-r'_1, \dots, -r'_n) \prod_b d^3 r'_b. \quad (2)$$

Так как по условию $\Psi(-r_1, \dots, -r_n) = I\Psi(r_1, \dots, r_n)$, где $I = \pm 1$ — четность состояния, находим из (1) и (2) $\bar{d} = -\bar{d} = 0$.

1.17. Соотношение для оператора \hat{f} вида $A(\hat{f}) = B(\hat{f})$, где $A(z)$ и $B(z)$ — некоторые функции z , приводит к аналогичному соотношению $A(f_i) = B(f_i)$ для его с. з. Поэтому у оператора \hat{f} могут быть только такие с. з.: а) $f_{1,2} = \pm c$; б) $f_1 = 0, f_2 = c$; в) $f_1 = 0, f_{2,3} = \pm c$. Никаких других с. з. быть не может.

1.18. Уравнение для с. ф. и с. з. оператора \hat{f} и его решение имеют вид

$$-i\hat{\alpha}\Psi'_f(x) + \beta x\Psi_f(x) = f\Psi_f(x), \quad (1)$$

$$\Psi_f(x) = C \exp\{-i(\beta x - f)^2/2\hat{\alpha}\beta\} \quad (2)$$

($\hat{\alpha} = \alpha\hbar$). Из (2) следует, что с. з. f — произвольные вещественные величины (при комплексных значениях f в. ф. (2) возрастает

на больших расстояниях; α и β — вещественные параметры), спектр — непрерывный и с. з. — невырожденные. С учетом Д1.1 условие нормировки

$$\int \Psi_{f'}^*(x) \Psi_f(x) dx = \delta(f - f')$$

приводит к значению $C = (2\pi\tilde{\alpha})^{-1/2}$. Читателю предлагается показать полноту системы с. ф. (2).

1.19. Уравнение для с. ф. и с. з.:

$$f(x) \int f^*(x') \Psi_n(x') dx' = f_n \Psi_n(x)$$

имеет следующие решения. 1) Одна с. ф. $\Psi_0 = Cf(x)$ отвечает с. з. $f_0 = \int |f(x)|^2 dx > 0$. 2) Второе с. з. $f_1 = 0$ — бесконечнократно вырожденное. Ему отвечают с. ф. $\Psi_l(x)$, обладающие свойством $\int f^*(x) \Psi_l(x) dx = 0$ (т. е., как и должно быть, эти функции ортогональны с. ф. Ψ_0 , отвечающей другому с. з.). Никаких других с. з. не существует.

1.20. С. ф. оператора K — это функции вида $\Psi_\alpha = e^{i\alpha} g(x)$, где $g(x)$ — произвольная вещественная функция, а α — любое вещественное число. Они соответствуют с. з. $k_\alpha = e^{-2i\alpha}$.

1.21. Подействовав оператором $\hat{G} \equiv (\hat{f} - f_1)(\hat{f} - f_2) \dots (\hat{f} - f_N)$ на произвольную функцию Ψ , получим $\hat{G}\Psi = 0$. Действительно, Ψ можно представить в виде суперпозиции с. ф. Ψ_{f_k} , образующих полную систему: $\Psi = \sum_k c_k \Psi_{f_k}$, а $(\hat{f} - f_k)\Psi_{f_k} = 0$.

Итак, $\hat{G} \equiv 0$; отсюда и следует утверждение задачи:

$$\hat{f}^N - \sum_{i=1}^N f_i \hat{f}^{N-1} + \frac{1}{2} \sum_{i, k; i \neq k} f_i f_k \hat{f}^{N-2} + \dots + (-1)^N \prod_{i=1}^N f_i = 0. \quad (1)$$

При $N = 2$ из (1) имеем $\hat{f}^2 = (f_1 + f_2)\hat{f} - f_1 f_2$. Отсюда в случае оператора отражения, у которого с. з. равны ± 1 , получаем $\hat{f}^2 = 1$, как и следовало ожидать.

1.22. Имея в виду результат предыдущей задачи, можно записать

$$\hat{F} = F(\hat{f}) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \hat{f}^n; \quad F(f_i) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n f_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

(сравнить с 1.17). Второе из соотношений (1) представляет систему уравнений, позволяющую определить значения c_n .

В случае $N = 2$ легко находим $c_{0, 1}$, а с ними и

$$\hat{F} = \frac{f_2 F(f_1) - f_1 F(f_2)}{f_2 - f_1} + \frac{F(f_1) - F(f_2)}{f_1 - f_2} f. \quad (2)$$

В случае $N = 3$ для указанных в условии задачи с. з. с помощью (1) получаем

$$\hat{F} = F(0) + \frac{F(f_0) - F(-f_0)}{2f_0} f + \frac{F(f_0) + F(-f_0) - 2F(0)}{2f_0^2} f^2. \quad (3)$$

1.23. Продифференцировав по λ обе части уравнения для с. ф. и с. з.: $\hat{f}(\lambda) \Psi_n(q, \lambda) = f_n(\lambda) \Psi_n(q, \lambda)$, получаем

$$\left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial \lambda} \right) \Psi_n(\lambda) + \hat{f} \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n(\lambda) = \frac{\partial f_n}{\partial \lambda} \Psi_n(\lambda) + f_n \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n(\lambda). \quad (1)$$

Умножим обе части (1) слева на Ψ_n^* и проинтегрируем по координатам q . Учитывая при этом равенство

$$\begin{aligned} \int \Psi_n^* \hat{f} \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n d\tau_q &= \\ &= \int (f \Psi_n)^* \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n(\lambda) d\tau_q = f_n \int \Psi_n^* \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n d\tau_q, \end{aligned}$$

вытекающее из эрмитовости \hat{f} , получаем искомое соотношение.

1.24. Оператор $\hat{F} = F(\hat{f})$ следует понимать как оператор, с. ф. которого совпадают с с. ф. оператора \hat{f} , а соответствующие с. з. равны $F_i = F(f_i)$. Так как система собственных функций Ψ_f является полной (при этом существенна эрмитовость оператора \hat{f}), то действие F на произвольную функцию Ψ определено; действительно

$$\hat{F}\Psi = \hat{F} \sum_n c(f_n) \Psi_{f_n}(q) \equiv \sum_n c(f_n) F(f_n) \Psi_{f_n}(q). \quad (1)$$

Воспользовавшись здесь выражением (1.4) для $c(f)$, находим, что оператор F представляет интегральный оператор с ядром²⁾

$$F(q, q') = \sum_n F(f_n) \Psi_{f_n}(q) \Psi_{f_n}^*(q'). \quad (2)$$

²⁾ Система с. ф. $\Psi_{f_n}(q)$ предполагается ортонормированной.

Так как $(-\Delta)^{-1/2} = \hbar (\hat{p}^2)^{-1/2} \equiv \hbar / |\hat{p}|$, то согласно (2) ядро этого оператора имеет вид

$$\hbar P^{-1}(r, r') = \frac{\hbar}{(2\pi\hbar)^3} \int p^{-1} e^{i\hat{p}(r-r')/\hbar} d^3p = [2\pi^2 (r-r')^2]^{-1}$$

(для вычисления интеграла удобно воспользоваться сферическими координатами, выбрав полярную ось вдоль вектора $r-r'$).

1.25. Из операторного равенства $\hat{A}\hat{L} - \hat{L}\hat{A} = 0$, примененного к с. ф. Ψ_{L_i} оператора \hat{L} (L_i — с. з.), следует, что функция $\hat{A}\Psi_{L_i}$ также является с. ф. \hat{L} , отвечающей тому же с. з. L_i (или $\hat{A}\Psi_{L_i} = 0$). Если при этом с. з. L_i является невырожденным, то $\hat{A}\Psi_{L_i} = A_i\Psi_{L_i}$, т. е. Ψ_{L_i} является с. ф. и оператора \hat{A} . Точно так же она является и с. ф. \hat{B} , т. е. $\hat{B}\Psi_{L_i} = B_i\Psi_{L_i}$. Если бы все с. з. L_i были невырожденными, то во всех состояниях имело бы место соотношение $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi_{L_i} = (A_iB_i - B_iA_i)\Psi_{L_i} = 0$. Но такое равенство, справедливое для всех с. ф., образующих полную систему, означало бы $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, что противоречит условию задачи.

В качестве иллюстрации рассмотрим свободное одномерное движение частицы. Ее гамильтониан $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ коммутирует с операторами импульса \hat{p} и отражения \hat{I} , не коммутирующими друг с другом. Это обстоятельство объясняет двукратное вырождение уровней энергии.

1.26. а) Операторы различных компонент момента не коммутируют друг с другом, но в состоянии с моментом $L = 0$ все компоненты момента одновременно имеют определенные значения $L_i = 0$. Еще один пример — см. 1.27. б) Операторы импульса и кинетической энергии коммутируют друг с другом, но, например, функция $\Psi = C \sin(p\hat{r}/\hbar)$ является с. ф. лишь оператора кинетической энергии, но не импульса.

Эти примеры не противоречат, конечно, общим квантовомеханическим утверждениям об одновременной измеримости двух физических величин, в том числе и соотношению неопределенности, см. 1.30.

1.27. Имеем $(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})\Psi_{ab} = (ab + ba)\Psi_{ab} = 2ab\Psi_{ab} = 0$. Таким образом, либо a , либо b равно нулю. Пример: $\hat{I}\hat{x} + \hat{x}\hat{I} = 0$; при этом имеется только одна в. ф.: $\Psi_0 = C\delta(x)$, являющаяся с. ф. операторов \hat{x} и \hat{I} одновременно, причем с. з. координаты $x_0 = 0$. Отметим, что антикоммутирующие операторы могут и не иметь ни одной общей с. ф. (см. матрицы Паули, глава 5 «Спин»).

1.28. В классической механике $p_r = m\dot{r} = p_n$, где $n = r/r$. Квантовомеханическим аналогом этого соотношения является эрмитов оператор

$$\hat{p}_r \equiv \frac{1}{2} (\hat{p}\hat{n} + \hat{n}\hat{p}) = \hat{p}\hat{n} + \frac{\hbar}{2i} \operatorname{div} n = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r. \quad (1)$$

Решение уравнения на с. ф. и с. з. этого оператора имеет вид $\Psi_{p_r}(r) = (C(\theta, \varphi)/r) \exp(ip_r r/\hbar)$, где $C(\theta, \varphi)$ — произвольная функция угловых переменных. При этом формально с. з. p_r могут принимать комплексные значения $p_r = p_1 + ip_2$ с $p_2 \geq 0$, а с. ф., как легко убедиться, не являются ортогональными.

Установленные свойства с. з. и с. ф. оператора \hat{p}_r , исключаяющие их физическую интерпретацию, иллюстрируют деликатность положения квантовой механики о сопоставлении физическим величинам (*наблюдаемым* — по терминологии Дирака) эрмитовых, или самосопряженных, операторов. С физической точки зрения этот пример показывает, что не всякая физическая величина классической механики имеет четкий квантовомеханический аналог (так же, как не всякая квантовомеханическая величина — например четность — имеет классический аналог). В математическом плане он отражает различие понятий эрмитова и самосопряженного операторов и свойств их с. з. и с. ф.: оператор \hat{p}_r эрмитов, но не самосопряженный, см. следующую задачу.

1.29. Понятия эрмитова и самосопряженного операторов довольно близки и связаны с существованием соотношений

$$\int \Psi_2^* \hat{f} \Psi_1 d\tau = \int (\hat{f}^+ \Psi_2)^* \Psi_1 d\tau = \int (\hat{f} \Psi_2)^* \Psi_1 d\tau, \quad (1)$$

а различие проявляется лишь в наличии ограничений на классы функций Ψ_1 и Ψ_2 , для которых они должны выполняться.

1) Если соотношение (1) выполнено на некотором классе функций \tilde{D}_f , то оператор \hat{f} называют эрмитовым (на этом классе функций). Если этот класс функций совпадает с областью определения D_f оператора \hat{f} (вообще говоря, он уже), то такой эрмитов оператор называют самосопряженным. При этом, по определению, область D_f включает все функции $\Psi_{\{f\}}$, для которых

$$\int |\Psi_{\{f\}}|^2 d\tau < \infty, \quad (2')$$

$$\int |\hat{f} \Psi_{\{f\}}|^2 d\tau < \infty, \quad \int \Psi_{\{f\}}^* \hat{f} \Psi_{\{f\}} d\tau < \infty, \quad (2'')$$

где Ψ — уже произвольная функция, удовлетворяющая лишь условию, аналогичному (2') (конечно, смысл могут иметь и выражения $\hat{f}\Psi$ для функций, не входящих в D_f). С. з.

самосопряженного оператора вещественны, а с. ф. взаимно ортогональны и образуют полную систему³⁾.

Так, в случае оператора $-i\hbar d/dx$, действующего в пространстве функций, заданных на всей оси, имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_1 dx = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \Psi_2 \right)^* \Psi_1 dx - i\hbar \Psi_2^* \Psi_1 \Big|_{-\infty}^{\infty}. \quad (3)$$

При этом для функций $\Psi_{1,2}$, входящих в область определения оператора, внеинтегральное слагаемое равно нулю, как это следует из условия (2'), так что оператор является самосопряженным. Его с. з. p_x вещественны, а с. ф. $\Psi_p(x)$ ортогональны и образуют полную систему.

Далее, эрмитовы, но не самосопряженные операторы делятся на два различных класса: а) *существенно самосопряженные операторы*, допускающие *самосопряженное расширение* и б) *максимально эрмитовы операторы* (не допускающие такого расширения).

2) Если реализация оператора \hat{f} как эрмитова с областью определения D_f такова, что соотношение (1) выполнено для любых функций $\Psi_{1,2}$ из D_f и нарушается, если хотя бы одна из них таковой не является, то говорят о самосопряженном расширении эрмитова оператора, связанном с теми дополнительными (типа граничных) условиями, которые отвечают данной реализации и ограничивают область функций D_f . Свойства с. з. и с. ф., удовлетворяющих указанным условиям, такие же, как и у самосопряженных операторов.

Так, в случае оператора $-i\hbar d/dx$, действующего в пространстве функций, заданных на конечном отрезке, имеем

$$\int_a^b \Psi_2^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_1 dx = \\ = \int_a^b \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \Psi_2 \right)^* \Psi_1 dx - i\hbar \Psi_2^*(x) \Psi_1(x) \Big|_a^b. \quad (4)$$

³⁾ При этом, однако, с. ф. уже могут быть и не нормируемы на единицу, т. е. для них не требуется существования интегралов (2), а условие ортогональности формулируется с помощью δ -функции.

Внеинтегральное слагаемое, вообще говоря, отлично от нуля, так что оператор не является самосопряженным, но он эрмитов и допускает самосопряженное расширение. Например, он эрмитов на классе функций, удовлетворяющих граничным условиям $\Psi(a) = \Psi(b) = 0$. Однако такие условия не реализуют самосопряженного расширения. Действительно, для обращения внеинтегрального слагаемого в нуль при этом достаточно, чтобы лишь одна из функций, Ψ_1 или Ψ_2 , удовлетворяла этому условию. При таком выборе граничного условия у оператора $-i\hbar d/dx$ вообще нет с. ф.

Другая реализация оператора как эрмитова связана с наложением граничного условия

$$\Psi_1(b)/\Psi_1(a) = (\Psi_2(a)/\Psi_2(b))^* = \text{const} = \exp(i\beta), \quad (5)$$

где β — вещественное число. Выбор такого граничного условия определяет самосопряженное расширение оператора $-i\hbar d/dx$ на отрезке. При этом с. з. и с. ф. оператора:

$$\lambda_n = (\beta + 2\pi n) \hbar / (b - a), \quad \Psi_n = (b - a)^{-1/2} \exp(i\lambda_n x / \hbar), \\ n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

причем с. ф. ортогональны и образуют полную систему.

Отметим, что к такому типу операторов принадлежит $l_z = -i\hbar d/d\phi$ — оператор проекции орбитального момента на ось z , при этом $a = 0$, $b = 2\pi$, $\beta = 0$.

3) Если у эрмитова оператора не существует самосопряженных расширений, то его называют максимально эрмитовым оператором.

Оператор $-i\hbar d/dx$, действующий в пространстве функций, заданных на полуоси, представляет пример такого оператора:

$$\int_0^{\infty} \Psi_2^*(x) (-i\hbar \Psi_1'(x)) dx = \\ = \int_0^{\infty} (-i\hbar \Psi_2'(x))^* \Psi_1(x) dx + i\hbar \Psi_2^*(0) \Psi_1(0). \quad (6)$$

Единственная реализация его как эрмитова оператора связана с наложением граничного условия $\Psi(0) = 0$, причем для выполнения соотношения (1) этому условию в (6) должна удовлетворять лишь одна из функций $\Psi_{1,2}$, так что оператор является максимально эрмитовым. С. ф., удовлетворяющих граничному условию $\Psi(0) = 0$, у этого оператора не существует (если же «забыть» о граничном условии, то с. з. оказываются комплексными, а с. ф. не ортогональными, как и в случае оператора β_n

рассмотренного в предыдущей задаче и также являющегося максимально эрмитовым оператором).

В заключение сделаем два замечания. Во-первых, классификация данного эрмитова оператора \hat{f} может быть просто установлена по его так называемым индексам дефекта (N_+, N_-) , где N_{\pm} — числа независимых нормируемых на 1 решений уравнения на с. ф. вида $\hat{f}\Psi = \pm if_0\Psi$ (f_0 вещественно, фиксировано и введено лишь для соблюдения размерности). Если $N_+ = N_- = 0$, то оператор самосопряженный; если $N_+ = N_- = N \neq 0$, то оператор допускает самосопряженное расширение, реализуемое наложением N дополнительных условий; если $N_+ \neq N_-$, то оператор максимально эрмитов. Читателю предлагается проиллюстрировать это положение на примере рассмотренного оператора $-i\hbar d/dx$.

Во-вторых, в задачах квантовой механики часто приходится сталкиваться именно с самосопряженным расширением эрмитовых операторов. При этом выбор дополнительных условий обычно диктуется физическими соображениями. В дополнение к отмеченному выше случаю оператора \hat{I}_z укажем на самосопряженное расширение оператора $\hat{p}^2/2m$ на отрезке с использованием граничных условий ⁴⁾ $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$, реализующееся в задаче о частице в бесконечно глубокой потенциальной яме. Далее, используемое при решении уравнения Шрёдингера условие ограниченности в. ф. в нуле (т. е. при $r = 0$), даже в случае «хороших» потенциалов $U(r)$, реализует фактически самосопряженное расширение оператора Гамильтона. При этом более общее условие самосопряженного расширения вида

$$(r\Psi(r))'/(r\Psi(r)) \rightarrow \alpha = \text{const} \quad \text{при } r \rightarrow 0$$

с физической точки зрения соответствует включению дополнительного взаимодействия в виде *потенциала нулевого радиуса* (см. 4.10). В случае же *сингулярных* потенциалов притяжения, когда в квантовой механике возникает «падение на центр» (см. [1], § 35), указанные граничные условия уже не реализуют самосопряженного расширения и должны быть модифицированы (см. 9.14).

1.30. Рассмотрим интеграл $J(\alpha) = \int |(\alpha\hat{A}_1 - i\hat{B}_1)\Psi|^2 d\tau \geq 0$, где $\hat{A}_1 = \hat{A} - a$, $\hat{B}_1 = \hat{B} - b$; причем α , a , b — вещественные параметры. Используя эрмитовость операторов \hat{A}_1 и \hat{B}_1 , соотноше-

⁴⁾ При этом самосопряженное расширение определяется наложением двух граничных условий: $\Psi(0) = 0$ и $\Psi(a) = 0$ в соответствии с тем, что индексы дефекта оператора $\hat{p}^2/2m$, заданного на отрезке, суть (2,2) (приведенные условия реализуют один из частных случаев самосопряженного расширения).

ние $[\hat{A}_1, \hat{B}_1] = iC$ и считая в. ф. Ψ нормированной на 1, интеграл можно преобразовать к виду

$$J = \int ((\alpha \hat{A}_1 - i \hat{B}_1) \Psi)^* (\alpha \hat{A}_1 - i \hat{B}_1) \Psi d\tau = \\ = \int \Psi^* (\alpha^2 \hat{A}_1^2 - i\alpha [\hat{A}_1, \hat{B}_1] + \hat{B}_1^2) \Psi d\tau = \\ = \alpha^2 (\overline{\hat{A} - a})^2 + \alpha \bar{C} + \overline{(\hat{B} - b)^2} \geq 0. \quad (1)$$

Положим $a = \bar{A}$, $b = \bar{B}$; при этом условие неотрицательности квадратного трехчлена (1) по α приводит к утверждению задачи

$$\overline{(\hat{A} - \bar{A})^2} \cdot \overline{(\hat{B} - \bar{B})^2} \geq (\bar{C})^2/4. \quad (2)$$

Равенство в (2) реализуется лишь при условии $(\alpha \hat{A}_1 - i \hat{B}_1) \Psi = 0$. В частности, для операторов $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$, $\bar{C} = \hbar$ оно принимает вид $\Psi' + ((x - x_0)/d^2 - ip_0/\hbar) \Psi = 0$ (вместо $\alpha < 0$, a , b введены более удобные их вещественные комбинации x_0 , p_0 , d). Отсюда

$$\Psi = (\pi d^2)^{-1/4} \exp [ip_0 x/\hbar - (x - x_0)^2/2d^2],$$

что определяет явный вид в. ф., минимизирующей соотношение неопределенности для координаты и импульса (см. также 1.13).

При приложениях формулы (2) следует соблюдать осторожность. Это видно уже из результата ее применения к случаю операторов $\hat{A} = \hat{l}_z = -i\partial/\partial\varphi$ и $\hat{B} = \hat{\phi} = \varphi$, для которых она дает $\overline{(\Delta l_z)^2} \cdot \overline{(\Delta\varphi)^2} \geq 1/4$, что физически бессмысленно, так как $\overline{(\Delta\varphi)^2}$ во всяком случае не превышает π^2 , а $\overline{(\Delta l_z)^2}$ может быть равным нулю.

Дело в том, что при выводе формулы (1) были использованы соотношения

$$\int (\hat{A}\Psi)^* (\hat{A}\Psi) d\tau = \int \Psi^* \hat{A}^2 \Psi d\tau, \quad \int (\hat{A}\Psi)^* (\hat{B}\Psi) d\tau = \int \Psi^* \hat{A}\hat{B}\Psi d\tau$$

и аналогичные им с взаимной перестановкой \hat{A} и \hat{B} . Обоснование их состояло в ссылке на эрмитовость операторов. Однако если иметь в виду результат предыдущей задачи, такая аргументация обоснована лишь в случае самосопряженных операторов, а для операторов физических величин, представляющих самосопряженное расширение эрмитова оператора (таковым является \hat{l}_z), требуется большее: необходимо, чтобы не только в. ф. Ψ , но и функция $\hat{B}\Psi$ входили в область определения оператора \hat{A} как эрмитова (и аналогично $\hat{A}\Psi$ по отношению к \hat{B}). Если эти условия выполнены, то соотношение (2) сохраняет свою силу. В частности, в рассматриваемом случае операторов \hat{l}_z и $\hat{\phi}$

для этого требуется, чтобы в. ф. состояния удовлетворяла условию $\Psi(0) = \Psi(2\pi) = 0$ (при этом $\Psi = \varphi\Psi(\varphi)$ входит в область эрмитовости I_z); для таких состояний справедливо соотношение $\overline{(\Delta I_z)^2} \cdot \overline{(\Delta \varphi)^2} \geq 1/4$. Оно допускает обобщение и на случай произвольных состояний:

$$\overline{(\Delta I_z)^2} \cdot \overline{(\Delta \varphi)^2} \geq (1 - 2\pi |\Psi(0)|^2)^2/4,$$

которое читателю предлагается получить самостоятельно.

1.31. Записав произвольные функции Ψ и Φ в виде $\Psi = \sum_k c_k \Psi_{f_k}$ и $\Phi = \sum_k b_k \Psi_{f_k}$ (считаем, для простоты записи, спектр с. з. невырожденным), убеждаемся в эрмитовости оператора $P(f_i)$:

$$\begin{aligned} \int \Phi^* \hat{P}(f_i) \Psi \, d\tau &= c_i \int \Phi^* \Psi_{f_i} \, d\tau = c_i b_i^* = \\ &= \int [\hat{P}(f_i) \Phi]^* \Psi \, d\tau \equiv \int [\hat{P}^+(f_i) \Phi]^* \Psi \, d\tau \end{aligned}$$

при преобразованиях учтена ортогональность с. ф. оператора \hat{P} . Из соотношений $\hat{P}^2(f_i) \Psi = \hat{P}(f_i) (c_i \Psi_{f_i}) = c_i \Psi_{f_i} = \hat{P}(f_i) \Psi$ следует, что $\hat{P}^2(f_i) = \hat{P}(f_i)$; таким образом, $\hat{P}(f_i)$ — проекционный оператор, проектирующий на состояние с определенным значением f_i физической величины f . Далее, легко находим

$$\overline{\hat{P}(f_i)} = \int \Psi^* \hat{P}(f_i) \Psi \, d\tau = |c_i|^2 \equiv |c(f_i)|^2$$

(считаем в. ф. Ψ нормированной на 1), т. е. среднее $\overline{\hat{P}(f_i)}$ дает вероятность значения f_i величины f в рассматриваемом состоянии.

Очевидно, что $\hat{P}(\{f\}) = \sum_a \hat{P}(f_{i_a})$. Так как $\hat{P}(f_i) \hat{P}(f_k) = \delta_{ik} P(f_i)$, то при этом $\hat{P}^2(\{f\}) = \hat{P}(\{f\})$, как и следует.

Имея в виду, что операторы, входящие в полный набор, взаимно коммутируют, нетрудно сообразить, что

$$\hat{P}(f_i, g_k, \dots, t_l) = \hat{P}(f_i) \cdot \hat{P}(g_k) \dots \hat{P}(t_l).$$

1.32. По смыслу проекционного оператора $P(x_0 \geq a)$ должно быть $P\Psi(x) = \Psi(x)$ для $x \geq a$ и $P\Psi(x) = 0$ для $x < a$. Отсюда $P(x_0 \geq a) = \eta(x - a)$, где $\eta(z)$ — ступенчатая функция, равная $\eta = 1$ при $z > 0$ и $\eta = 0$ при $z < 0$. Очевидно, $P(x_0 \geq a)$ — эрмитов оператор и $P^2(x_0 \geq a) = P(x_0 \geq a)$.

1.33. Запишем произвольную функцию в виде суперпозиции четной и нечетной составляющих:

$$\Psi(r) = (\Psi(r) + \Psi(-r))/2 + (\Psi(r) - \Psi(-r))/2.$$

Так как по смыслу операторов \hat{P}_{\pm} должно быть $\hat{P}_{\pm}\Psi = (\Psi(r) \pm \Psi(-r))/2$, то они имеют вид $\hat{P}_{\pm} = (1 \pm I)/2$. При этом $\hat{P}_{\pm}^2 = \hat{P}_{\pm}$, а также $\hat{P}_{+} + \hat{P}_{-} = 1$.

1.34. Оператор \hat{P} с ядром $P(x, x') = cf(x)f^*(x')$, где $c^{-1} = \int |f(x)|^2 dx$, является проекционным. Он проектирует на состояние, описываемое в. ф. $\Psi_0(x) \equiv f(x)$.

1.35. Пусть сначала $N = 2$. При этом из условия $\hat{P}(f_1)\Psi_{f_2} = 0$ следует, что $\hat{P}(f_1) = a(f_1 - f_2)$, а из условия $\hat{P}(f_1)\Psi_{f_1} = \Psi_{f_1}$ находим $a = (f_1 - f_2)^{-1}$. Обобщение на случай произвольного N очевидно:

$$\hat{P}(f_i) = \prod_{k=1}^N (f_i - f_k)^{-1} (f_i - f_k),$$

где штрих у символа произведения означает отсутствие сомножителя с $k = i$.

$$1.36. \Psi_{r_0}(r) = \delta(r - r_0), \quad \Psi_{p_0}(r) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(ip_0 r/\hbar),$$

$$\Phi_{r_0}(p) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(-ipr_0/\hbar), \quad \Phi_{p_0}(p) = \delta(p - p_0).$$

$$1.37. \Phi(p) = \sqrt{a^2/\hbar} C \exp(-i(p - p_0)x_0/\hbar - a^2(p - p_0)^2/2\hbar^2).$$

1.38. Искомая вероятность

$$w = \int_{z_1}^{z_2} \int_{p_1}^{p_2} \int_{-\infty}^{\infty} |F(x, p_y, z)|^2 dx dp_y dz,$$

где

$$F(x, p_y, z) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int \Psi(x, y, z) \exp(-ip_y y/\hbar) dy,$$

причем функция Ψ предполагается нормированной на 1.

1.39. 1) В координатном представлении $\Psi_2(x) = I\Psi_1(x) \equiv \Psi_1(-x)$. Умножим эти соотношения на $\Psi_p^*(x) \equiv (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(-ipx/\hbar)$ и проинтегрируем по x . В результате получим

$$\Phi_2(p) = \hat{I}\Phi_1(p) \equiv (2\pi\hbar)^{-1/2} \int \exp(-ipx/\hbar) \Psi_1(-x) dx, \quad (1)$$

где $\Phi_{1,2}(p) = \int \Psi_p^*(x) \Psi_{1,2}(x) dx$ — в. ф. в импульсном представлении. Замечая, что интеграл в (1) равен $\Phi_1(-p)$, имеем $I\Phi_1(p) \equiv \Phi_1(-p)$, т. е. I в импульсном представлении также является оператором отражения.

Аналогично находим и для других операторов:

$$2) \hat{T}_a \Phi(p) \equiv \exp(ipa/\hbar) \Phi(p); \quad 3) \hat{M}_c \Phi(p) \equiv (1/\sqrt{c}) \Phi(p/\sqrt{c})$$

$$4) \hat{K} \Phi(p) \equiv \Phi^*(-p); \quad 5) \hat{P}_{12} \Phi(p_1, p_2) \equiv \Phi(p_2, p_1).$$

1.40. Так как $\hat{p}\hat{p}^{-1} \equiv 1$; то $(d/dx)(\hat{p}^{-1}\Psi(x)) \equiv (i/\hbar)\Psi(x)$. Интегрируя в пределах от $-\infty$ до x , находим явный вид оператора \hat{p}^{-1} в координатном представлении:

$$\frac{\hat{1}}{p} \Psi(x) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^x \Psi(x') dx'. \quad (1)$$

С другой стороны, интегрируя в пределах от x до ∞ , получаем несколько иное соотношение:

$$\frac{\hat{1}}{p} \Psi(x) = -\frac{i}{\hbar} \int_x^{\infty} \Psi(x') dx'. \quad (2)$$

Однако для функций, входящих в область определения оператора \hat{p}^{-1} , оно совпадает с (1). Такие функции должны удовлет-

ворять соотношению $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) dx = 0$, обеспечивающему обращение в нуль функции $\hat{p}^{-1}\Psi(x)$ при $x \rightarrow \pm\infty$, как этого требует

условие ⁵⁾ $\int |\hat{f}\Psi|^2 d\tau < \infty$ для всех функций из области определения D_f оператора \hat{f} (см. 1.29).

Заметим, что с. ф. оператора \hat{p}^{-1} являются, как и следовало ожидать, с. ф. оператора импульса.

⁵⁾ В импульсном представлении $\hat{p}^{-1} \equiv p^{-1}$ и это условие принимает вид $\int p^{-2} |\Phi(p)|^2 dp < \infty$; отсюда $\Phi(0) = 0$, что тождественно $\int \Psi(x) dx = 0$.

Аналогично для оператора \hat{x}^{-1} в p -представлении получаем:

$$\frac{\hat{1}}{x} \Phi(p) = \frac{i}{\hbar} \int_p^{\infty} \Phi(p') dp' = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^p \Phi(p') dp';$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p) dp = 0$$

(см. задачу 4.15, в которой это соотношение используется при решении уравнения Шрёдингера в импульсном представлении для частицы в кулоновском потенциале).

1.41. Приведем ответ:

$$L(p, p') = (2\pi\hbar)^{-3} \int \int \exp(i(p'r' - pr)/\hbar) L(r, r') dV dV',$$

$$L(r, r') = (2\pi\hbar)^{-3} \int \int \exp(i(pr - p'r')/\hbar) L(p, p') d^3p d^3p'.$$

1.42. Оператор $\hat{G}_1 \equiv \frac{\hat{1}}{r}$ имеет в координатном представлении ядро $G_1(r, r') = r^{-1}\delta(r - r')$, а в импульсном представлении (см. 1.41) его ядро

$$G_1(p, p') = (2\pi\hbar)^{-3} \int r^{-1} \exp(i(p' - p)r/\hbar) dV = [2\pi^2\hbar(p - p')^2]^{-1}.$$

Для оператора $\hat{G}_2 \equiv \frac{\hat{1}}{r^2}$ аналогично находим

$$G_2(r, r') = r^{-2}\delta(r - r') \quad \text{и} \quad G_2(p, p') = [4\pi\hbar^2 |p - p'|]^{-1}$$

(по поводу вычисления интегралов см. Д1.4). Читателю предлагается показать, что $G_2 = G_1 \cdot G_1$ (в импульсном представлении).

1.43. Обозначим $\Psi_{A_n}(q)$ и $\Psi_{B_n}(q)$ с.ф. операторов A и B в некотором q -представлении, а $\Psi(q)$ — в.ф. произвольного состояния. В.ф. этого состояния в A - и B -представлениях, $a(A_n)$ и $b(B_n)$, определяются соотношениями

$$\Psi(q) = \sum_n a(A_n) \Psi_{A_n}(q), \quad a(A_n) = \int \Psi_{A_n}^* \Psi d\tau,$$

$$\Psi(q) = \sum_m b(B_m) \Psi_{B_m}(q), \quad b(B_m) = \int \Psi_{B_m}^* \Psi d\tau \quad (1)$$

(для простоты записи мы ограничились случаем, когда спектры операторов A и B — дискретные и невырожденные).

Взяв в качестве Ψ с. ф. Ψ_{B_k} , находим согласно (1) ее вид в A -представлении

$$a_{B_k}(A_n) = \int \Psi_{A_n}^*(q) \Psi_{B_k}(q) dq, \quad (2)$$

и аналогично получаем вид с. ф. Ψ_{A_n} в B -представлении

$$b_{A_n}(B_k) = \int \Psi_{B_k}^*(q) \Psi_{A_n}(q) dq. \quad (3)$$

Из выражений (2) и (3) вытекает $a_{B_k}(A_n) = b_{A_n}^*(B_k)$; как иллюстрацию этого соотношения см. задачу 1.36. Из установленного результата следует равенство вероятностей $w_{B_k}(A_n) = |a_{B_k}(A_n)|^2 = |b_{A_n}(B_k)|^2 = w_{A_n}(B_k)$ (его приложения см. в 3.14, 3.33).

1.44. Унитарными являются операторы I , T_a , M_c , P_{12} .

1.45. Из $O^2 = O$ и $OO^+ = O^+O = 1$ следует $O = 1$.

1.46. $|c| = 1$, т. е. $c = \exp(i\alpha)$, α — вещественное число.

1.47. Из $\hat{U} = \hat{U}_1 \hat{U}_2$ следует $\hat{U}^+ = \hat{U}_2^+ \hat{U}_1^+$, откуда $\hat{U} \hat{U}^+ = \hat{U}_1^+ \hat{U}_1 = 1$ (здесь учтена унитарность операторов $O_{1,2}$).

1.48. Из условий как унитарности, $OO^+ = 1$, так и эрмитовости, $O^+ = O$, оператора следует $O^2 = 1$. Таким является оператор, имеющий с. з., равные только ± 1 (сравнить с 1.17). Примеры: операторы отражения I и перестановки P_{12} из 1.1; матрицы Паули (см. гл. 5).

1.49. Запишем $\hat{U} = (\hat{U} + \hat{U}^+)/2 + i(\hat{U} - \hat{U}^+)/2i$. Так как $\hat{U} \hat{U}^+ = \hat{U}^+ \hat{U} = 1$, то $[(\hat{U} + \hat{U}^+), (\hat{U} - \hat{U}^+)] = 0$. Поэтому эрмитовы операторы $\hat{U} + \hat{U}^+$ и $(\hat{U} - \hat{U}^+)/i$, а с ними и O , могут быть одновременно приведены к диагональному виду. При этом с. з. u_k оператора \hat{U} удовлетворяют условию $|u_k| = 1$.

1.50. Так как $O^+ = \exp(-iF^+) = \exp(-iF)$, то $OO^+ = O^+O = 1$. При этом с. з. u_k оператора O связаны с с. з. f_k оператора F : $u_k = \exp(if_k)$.

Далее:

а) $\hat{I} = \exp(i\pi(\hat{I} - 1)/2)$; б) $\hat{T}_a = \exp(ia\hat{n}^{-1}\rho)$;

в) $\hat{M}_c = \exp\{i\hat{n}^{-1} \ln c \cdot (\hat{x}\rho + \rho\hat{x})/2\}$.

Эти соотношения следуют из 1.7, см. также 1.57.

1.51. Из условий $\hat{U}^+ \hat{U} = 1$ и $\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^+$ следует

$$\text{Sp } \hat{A}' = \text{Sp}(\hat{U} \hat{A} \hat{U}^+) = \text{Sp}(\hat{A} \hat{U}^+ \hat{U}) = \text{Sp } \hat{A}.$$

$$\det \hat{A}' = \det (\hat{U} \hat{A} \hat{U}^+) = \det (\hat{A} \hat{U}^+ \hat{U}) = \det \hat{A}.$$

1.52. Унитарным преобразованием эрмитова матрица может быть приведена к диагональному виду. В новом представлении, в котором $(\exp \hat{A})_{nm} = (\exp A_n) \delta_{nm}$, приведенное в условии соотношение очевидно, а в силу инвариантности шпура и детерминанта матрицы относительно унитарных преобразований оно справедливо и в произвольном представлении.

1.53. С одной стороны, $\det (\hat{U} \hat{U}^+) = \det \hat{1} = 1$. В то же время $\det (\hat{U} \hat{U}^+) = \det \hat{U} \cdot \det \hat{U}^+$ и $\det \hat{U}^+ = \det \hat{U}^* = (\det \hat{U})^*$. Таким образом, $|\det \hat{U}|^2 = 1$, т. е. $\det \hat{U} = \exp(i\alpha)$, где α — вещественное число (этот же результат следует из свойства с.з. u_k , см. 1.50). Если ввести матрицу $O' = \exp(-i\alpha/N) O$, где N — ее ранг, то для нее $\det O' = 1$.

Для оператора $O = \exp(iF)$ согласно 1.52 имеем соотношение $\det O = \exp(i \text{Sp } F)$.

1.54. Всего имеется N^2 независимых матриц ранга N . Очевидно, столько же имеется независимых эрмитовых матриц. Число независимых унитарных матриц также равно N^2 , так как между ними и эрмитовыми матрицами имеется соответствие: $O = \exp(iF)$, см. 1.50. Чтобы унитарная матрица была унимодулярной, необходимо, чтобы $\text{Sp } \hat{F} = 0$, см. 1.53, так что число независимых унимодулярных матриц, как и число эрмитовых матриц $\hat{F}' = \hat{F} - N^{-1} \text{Sp } \hat{F} \cdot \hat{1}$ с равным нулю следом, равно $N^2 - 1$.

1.55.

$$\begin{aligned} \hat{F}' &= \hat{U} \hat{F} \hat{U}^+ = \hat{U} \left[c_0 + \sum_l c_l \hat{A}_l + \sum_{lk} c_{lk} \hat{A}_l \hat{A}_k + \dots \right] \hat{U}^+ = \\ &= c_0 + \sum_l c_l \hat{U} \hat{A}_l \hat{U}^+ + \sum_{lk} c_{lk} \hat{U} \hat{A}_l \hat{A}_k \hat{U}^+ + \dots = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Учитывая, что $O^+ O = 1$, произвольный член суммы в выражении (1) можно записать в виде

$$\begin{aligned} c_{lk \dots n} \hat{U} \hat{A}_l \hat{A}_k \dots \hat{A}_n \hat{U}^+ &= c_{lk \dots n} \hat{U} \hat{A}_l \hat{U}^+ + \hat{U} \hat{A}_k \hat{U}^+ \dots \hat{U} \hat{A}_n \hat{U}^+ = \\ &= c_{lk \dots n} \hat{A}'_l \hat{A}'_k \dots \hat{A}'_n, \end{aligned}$$

так что (1) принимает вид

$$c_0 + \sum_l c_l \hat{A}'_l + \sum_{lk} c_{lk} \hat{A}'_l \hat{A}'_k + \dots = F(\hat{A}'_l) = 0,$$

что по форме совпадает с исходным соотношением и доказывает его инвариантность при унитарном преобразовании операторов.

1.56. Операторы $\hat{x}' = O\hat{x}O^+$ и $\hat{p}' = O\hat{p}O^+$ имеют вид:

а) $\hat{x}' = -\hat{x}, \hat{p}' = -\hat{p};$

б) $\hat{x}' = \hat{x} + a, \hat{p}' = \hat{p};$

в) $\hat{x}' = c\hat{x}, \hat{p}' = c^{-1}\hat{p}.$

Приведенные соотношения наиболее просто получить, если воспользоваться координатным представлением. Так для

$$\hat{U} = \hat{T}_a \text{ имеем } \hat{U}^+ = \hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}, \text{ см. 1.1, и}$$

$$\begin{aligned} \hat{x}'\Psi(x) &= \hat{U}\hat{x}\hat{U}^+\Psi(x) = \hat{T}_a x \hat{T}_{-a} \Psi(x) = \hat{T}_a(x\Psi(x-a)) = \\ &= (x+a)\Psi(x) = (\hat{x}+a)\Psi(x), \end{aligned}$$

Отсюда $\hat{x}' = \hat{x} + a$. Далее

$$\begin{aligned} \hat{p}'\Psi(x) &= \hat{U}(-i\hbar\partial/\partial x)\hat{U}^+\Psi(x) = -i\hbar\hat{T}_a(\partial/\partial x)\hat{T}_{-a}\Psi(x) = \\ &= -i\hbar\hat{T}_a(\partial/\partial x)\Psi(x-a) = -i\hbar(\partial/\partial x)\Psi(x) \end{aligned}$$

так что $\hat{p}' = \hat{p}$. Аналогично выводятся остальные соотношения.

1.57. В соотношении $O(a_1 + a_2) = O(a_2)O(a_1)$ положим $a_1 = a$ и $a_2 = da \rightarrow 0$. Учитывая, что $O(da) = 1 + idaF$, находим

$$d\hat{U} = \hat{U}(a + da) - \hat{U}(a) = i\hat{F}\hat{U}(a) da.$$

Отсюда, с учетом условия $O(0) = 1$, следует $O(a) = \exp(iaF)$ (то обстоятельство, что в данной задаче не возникает осложнений при решении дифференциального уравнения для операторов, связано с их коммутативностью).

При бесконечно малом сдвиге имеем

$$\hat{T}_{da}\Psi(x) = \Psi(x + da) \approx (1 + da(\partial/\partial x))\Psi(x),$$

так что $i\hat{F} = \partial/\partial x$ и $\hat{T}_a = \exp(a(\partial/\partial x))$.

В случае оператора \hat{M}_c введем сначала $c = e^a$ и запишем $\hat{M}_c \equiv \hat{M}(a)$. Зависимость $\hat{M}(a)$ от a удовлетворяет условиям рассматриваемой задачи. При этом

$$\begin{aligned} \hat{M}(da)\Psi(x) &\equiv \exp(da/2)\Psi(e^{da}x) \approx \\ &\approx (1 + da/2 + da \cdot x(\partial/\partial x))\Psi(x) \end{aligned}$$

так что $iF = 1/2 + x(\partial/\partial x)$ и $M_c = \exp\{-i \ln c(x \cdot i(\partial/\partial x) + i(\partial/\partial x)x)/2\}$ (сравнить полученные результаты с 1.7).

Г л а в а 2

ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

2.1. Уровни энергии и нормированные на единицу с. ф. гамильтониана частицы имеют вид

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2ma^2}, \quad \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a},$$

$$0 < x < a,$$

где $n = 0, 1, \dots$ ($\Psi \equiv 0$ при $x < 0$ и $x > 0$).

Искомые средние в n -м состоянии:

$$\bar{x} = a/2, \quad (\overline{\Delta x})^2 = a^2 \left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 (n+1)^2} \right],$$

$$\bar{p} = 0, \quad (\overline{\Delta p})^2 = \hbar^2 \pi^2 (n+1)^2 / a^2.$$

Нормируя приведенную в условии задачи в. ф., что дает $A = \sqrt{30/a^5}$, найдем коэффициенты C_n в разложении ее по с. ф. Ψ_n согласно (I. 4):

$$C_n = \sqrt{\frac{60}{a^6}} \int_0^a x(x-a) \sin \frac{\pi(n+1)x}{a} dx =$$

$$= -\frac{\sqrt{240}}{\pi^3} \frac{1 + (-1)^n}{(n+1)^3}.$$

Они определяют вероятность нахождения частицы в n -м квантовом состоянии и соответственно вероятность значения E_n энергии: $w(E_n) = |C_n|^2$; в частности, $w(E_0) \approx 0,999$. Наконец, по формуле (I. 5) для средних получаем $\bar{E} = 5\hbar^2/ma^2 \approx 1,013E_0$.

В связи с данной задачей см. также 8.23.

2.2. В этой задаче $U = kx^2/2 - e\mathcal{E}_0x$ ($-e\mathcal{E}_0x$ — потенциальная энергия заряженной частицы в однородном электрическом поле \mathcal{E}_0). У. Ш. заменой переменной $z = x - e\mathcal{E}_0/k$ сводится к у. Ш для обычного линейного осциллятора, что позволяет найти спектр и с. ф. гамильтониана:

$$E_n = \hbar\omega (n + 1/2) - e^2\mathcal{E}_0^2/2k, \quad \omega = \sqrt{k/m}, \quad n = 0, 1, \dots,$$

$$\Psi_n(x) = \Psi_n^{\text{осц}}(z) = \Psi_n^{\text{осц}}(x - e\mathcal{E}_0/k),$$

см. (II. 2). Установленный вид собственных функций гамильтониана частицы показывает, что как и в классическом случае, действие однородного поля на осциллятор сводится лишь к смещению его положения равновесия. Поляризуемости всех стационарных состояний осциллятора одинаковы и равны $\beta_0 = e^2/m\omega^2$.

2.3. Покажем, что $\bar{E}(\alpha) < 0$ при достаточно малых значениях α . Так как $E_0 \leq \bar{E}$, где E_0 — энергия основного уровня, то тем самым будет доказано утверждение задачи. Находим:

$\bar{T} = \bar{p}^2/2m = \hbar^2\alpha^2/2m \propto \alpha^2$, а $\bar{U} \approx \alpha \int U(x) dx \propto \alpha$ при $\alpha \rightarrow 0$, так что при этом $\bar{E}(\alpha) \approx \bar{U} < 0$.

2.4. Обозначим $E_n(\lambda)$ и $\Psi_n(x, \lambda)$ уровни д. с. и с. ф. гамильтониана $H(\lambda) = \hat{p}^2/2m + U(x) + \lambda\delta U(x)$. Согласно формуле (I. 6) имеем

$$dE_n(\lambda)/d\lambda = \int \delta U(x) |\Psi_n(x, \lambda)|^2 dx \geq 0.$$

Отсюда вытекает утверждение задачи, так как $E_n = E_n(\lambda = 0)$, а $E_n = E_n(\lambda = 1)$.

2.5. Уровни энергии в симметричном потенциале $U(x)$ имеют определенную четность, равную $(-1)^n$. При этом для нечетных состояний при $x \geq 0$ у. Ш. и условия $\Psi(0) = \Psi(\infty) = 0$ точно такие же, как и в потенциале U . Соответственно спектр E_k совпадает со спектром нечетных уровней в потенциале U , а нормированные с. ф. различаются лишь множителем:

$$\tilde{E}_k = E_{2k+1}, \quad \tilde{\Psi}_k(x) = \sqrt{2} \Psi_{2k+1}(x), \quad x \geq 0, \quad k = 0, 1, \dots;$$

здесь учтено, что четные и нечетные уровни чередуются, а самый нижний — четный (см. рис. 29).

$$2.6. \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_E''(x) + [\tilde{U}(x) + \alpha \delta(x - x_0)] \Psi_E(x) = E \Psi_E(x). \quad (1)$$

Из у. Ш. (1) вытекают непрерывность в. ф. $\Psi_E(x)$ в точке x_0 и разрывный характер ее производной. Величина скачка Ψ_E'

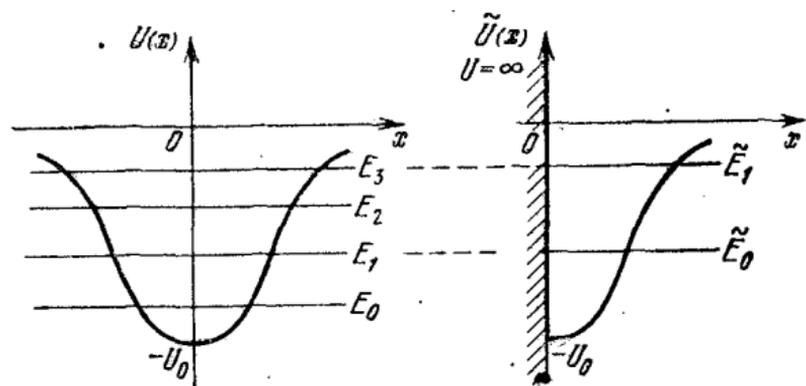


Рис. 29

должна быть такой, чтобы δ -функциональное слагаемое в Ψ_E'' (производная разрывной функции пропорциональна δ -функции) компенсировало член $\alpha \delta(x - x_0) \Psi_E(x_0)$ в левой части (1). Пронтегрировав (1) по узкой области $x_0 - \varepsilon \leq x \leq x_0 + \varepsilon$ и устремляя ε к 0, находим

$$\begin{aligned} \delta \Psi_E'(x_0) &\equiv \Psi_E'(x_0 + 0) - \Psi_E'(x_0 - 0) = (2m\alpha/\hbar^2) \Psi_E(x_0), \\ \Psi_E(x_0 + 0) &= \Psi_E(x_0 - 0). \end{aligned} \quad (2)$$

2.7. Решение ¹⁾ у. Ш с $U = -\alpha \delta(x)$ имеет вид $\Psi = Ae^{-\kappa x}$ при $x > 0$ и $\Psi = Be^{\kappa x}$ при $x < 0$; здесь $\kappa = (-2mE/\hbar^2)^{1/2} > 0$.

¹⁾ Экспоненциально растущие при $x \rightarrow \pm\infty$ слагаемые в решении у. Ш. опущены.

Используя соотношения (2) предыдущей задачи (с учетом замены в них α на $-\alpha$), находим $A = B$ и уравнение для спектра: $\kappa = m\alpha/\hbar^2$. Из него следует, что при $\alpha < 0$ (δ — барьер) связанных состояний нет, а при $\alpha > 0$ (δ — яма) имеется, причем только одно состояние д. с. с $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$; при этом нормированная в. ф.

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|}, \text{ где } \kappa_0 = m\alpha/\hbar^2.$$

Искомые средние

$$\bar{U} = 2E_0, \quad \bar{T} = -E_0, \quad \bar{x} = 0, \quad \overline{(\Delta x)^2} = 1/2\kappa_0^2, \quad \bar{p} = 0, \quad \overline{(\Delta p)^2} = \hbar^2\kappa_0^2.$$

В. ф. основного состояния в импульсном представлении

$$\Phi_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x) e^{-ipx/\hbar} dx = \frac{\sqrt{2\kappa_0^3\hbar^3}}{\sqrt{\pi}(p^2 + \hbar^2\kappa_0^2)} \quad (1)$$

сравнить с 2.17.

2.8. У. Ш. заменой переменной $z = \beta(x - E/F_0)$ с $\beta = (2mF_0/\hbar^2)^{1/3}$ приводится к виду $\Psi''(z) - z\Psi(z) = 0$. Его решением²⁾, убывающим при z (и x) $\rightarrow +\infty$, является функция Эйри $\text{Ai}(z)$. Соответственно $\Psi(x) = c \text{Ai}(\beta(x - E/F_0))$, при этом граничное условие $\Psi(0) = c \text{Ai}(-\beta E/F_0) = 0$ определяет энергетический спектр. Обозначив $-\alpha_k$, где $k = 1, 2, \dots$, последовательность нулей функции Эйри (они отрицательны) в порядке возрастания α_k , находим уровни энергии

$$E_n = (\hbar^2 F_0^2 / 2m)^{1/3} \alpha_{n+1}, \quad n = 0, 1, \dots \quad (1)$$

В частности, учтя значение $\alpha_1 \approx 2,338$, получаем для основного уровня $E_0 \approx 1,856 (\hbar^2 F_0^2 / m)^{1/3}$.

2.9. У. Ш. сводится к гипергеометрическому уравнению

$$zw'' + (1 + 2\kappa a - z)w' + (-\kappa a - 1/2 + b\beta/2)w = 0. \quad (1)$$

Так как $\Psi \propto e^{-ix} \propto z^{\kappa a}$ убывает при $x \rightarrow +\infty$ ($z \rightarrow 0$), то решение уравнения (1) следует выбрать в виде

$$w(z) = cF(\kappa a + 1/2 - b\beta/2, 1 + 2\kappa a, z). \quad (2)$$

Условие убывания $\Psi(x)$ при $x \rightarrow -\infty$ ($z \rightarrow +\infty$) требует, чтобы функция $F(\alpha, \beta, z)$ в (2) сводилась к полиному, что определяет

²⁾ См. [34, 35].

спектр:

$$\alpha = \kappa_n a + 1/2 - b\beta/2 = -n, \quad n = 0, 1, \dots, [b\beta/2 - 1/2],$$

или

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[\sqrt{mb^2 a^2 U_0 / 2\hbar^2} - (n + 1/2) \right]^2.$$

При этом условие $\sqrt{mb^2 a^2 U_0 / 2\hbar^2} = (N - 1/2)$ определяет значения параметров потенциала, соответствующие появлению нового, N -го по счету уровня д.с. при углублении потенциальной ямы.

2.10. Состояния д.с. могут быть лишь при $U_1 > U_2/2$ (иначе потенциал не имеет минимума), причем для значений $E < \min(0, U_1 - U_2)$. У.Ш. принимает вид: $(\kappa_{1,2}^2 = 2mU_{1,2}/\hbar^2)$, $\kappa = (-2mE/\hbar^2)^{1/2}$

$$z^2 w'' + \left[\frac{2\epsilon z^2}{1-z} + (2\mu + 1)z \right] w' + \left[\frac{\epsilon(\epsilon + 1)z^2 - \kappa_1^2 a^2}{(1-z)^2} + \frac{(2\epsilon\mu + \epsilon)z + \kappa_2^2 a^2}{1-z} - \kappa^2 a^2 + \mu^2 \right] w = 0. \quad (1)$$

Если параметры ϵ и μ выбрать равными

$$\epsilon = -1/2 + \sqrt{1/4 + \kappa_1^2 a^2}, \quad \mu = \sqrt{(\kappa^2 + \kappa_1^2 - \kappa_2^2) a^2},$$

то (1) приводится к гипергеометрическому уравнению

$$z(1-z)w'' + [2\mu + 1 - (2\mu - 2\epsilon + 1)z]w' - [\mu^2 + \kappa_1^2 a^2 - 2\epsilon\mu - \epsilon - \kappa^2 a^2]w = 0 \quad (2)$$

с параметрами

$$\alpha = \mu - \epsilon + \kappa a, \quad \beta = \mu - \epsilon - \kappa a, \quad \gamma = 1 + 2\mu.$$

Так как $\Psi(x)$ при $x \rightarrow -\infty$ ($z \rightarrow 0$) имеет вид $\Psi \propto e^{\mu x/a} = z^\mu$ то решение уравнения (2) следует выбрать в виде $w = cF(\alpha, \beta, \gamma, z)$. Соответственно

$$\Psi = c(1-z)^{-\epsilon} z^\mu F(\alpha, \beta, \gamma, z). \quad (3)$$

Отсюда при z (и x) $\rightarrow +\infty$ имеем

$$\Psi \approx \bar{c} z^{-\epsilon + \mu} \left\{ \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\beta - \alpha)}{\Gamma(\beta) \Gamma(\gamma - \alpha)} (-z)^{-\alpha} + \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha - \beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} (-z)^{-\beta} \right\}. \quad (4)$$

Так как $z^{-\epsilon+\mu-\beta} = e^{\chi x}$ возрастает при $x \rightarrow +\infty$, то необходимо потребовать³⁾ выполнения условия $\alpha = -n$, n — целое, которое фактически определяет энергетический спектр

$$\sqrt{-E_n} + \sqrt{U_1 - U_2 - E_n} = \sqrt{U_1 + \frac{\hbar^2}{8ma^2}} - \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)}, \quad n = 0, 1, \dots \quad (5)$$

Анализ спектра предлагается для самостоятельного исследования. Отметим в заключение, что при $U_1 = U_2 \equiv U_0$ рассмотренный потенциал переходит в $U = -U_0/(4 \operatorname{ch}^2(x/2a))$; см. [1, с. 98].

2.11. Стационарные состояния имеют определенную четность. В. ф. четных уровней при $0 < |x| \leq a$ имеют вид $\Psi^+ = A \sin(k(|x| - a))$ (учтено граничное условие $\Psi(a) = 0$), где $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$. Условия сшивания в. ф. в точке $x = 0$ (см. формулы (2) из 2.6) приводят к соотношению, определяющему спектр четных уровней

$$-\operatorname{tg} ka = ka/\xi, \quad \xi = ma/\hbar^2. \quad (1)$$

При $\xi \gg 1$ для нижних уровней (таких, что $ka \ll \xi$) в правой части (1) стоит малая величина. Поэтому $k_n a = n\pi - \epsilon$, где $\epsilon \ll 1$, а $n = 1, 2, \dots$ — порядковый номер корня (и четного уровня); согласно (1) находим $\epsilon \approx n\pi/\xi$, так что

$$E_n^+ \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} (1 - 2/\xi)$$

(индекс (+) указывает на четность уровня).

Для нечетных уровней в. ф. имеет вид $\Psi^- = B \sin kx$ и условие $\Psi^-(a) = 0$ определяет их спектр:

$$E_n^- = \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2ma^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

(в нечетных состояниях частица не чувствует наличия δ -потенциала).

Сравнение E_n^+ и E_n^- подтверждает указанный в условии задачи характер нижней части спектра.

Спектр четных уровней в области энергий $ka \gg \xi$ легко найти из (1), положив $k_n a = (n - 1/2)\pi + \epsilon$, $\epsilon \ll 1$:

$$E_n^+ \approx \hbar^2 \pi^2 (2n - 1)^2 / 8ma^2 + \alpha/2. \quad (2)$$

³⁾ При этом $\Gamma(\alpha) = \infty$ и второе слагаемое в (4), возрастающее при $x \rightarrow +\infty$, обращается в нуль; условие $\gamma - \beta = -n$ не может реализоваться.

Это первое длагаемое соответствует спектру четных уровней в бесконечно глубокой яме ширины $2a$, второе — смещению их под действием потенциала $\alpha\delta(x)$.

Заметим, что в случае $\alpha > 0$ в каждой паре близких уровней нижним является четный, при этом

$$\delta E_n = E_n^- - E_n^+ \approx (2\hbar^2/ma\alpha) E_n^\pm > 0. \quad (3)$$

В случае $\alpha < 0$ ситуация иная: теперь четный уровень является уже верхним. Однако в этом случае в нижней части спектра в дополнение к описанной картине пар близко расположенных уровней появляется еще один четный уровень с энергией $E_0^+ \approx \approx -\hbar^2\kappa_0^2/2m$ и в. ф. $\Psi_0^+ \approx \sqrt{\kappa_0} \exp(-\kappa_0|x|)$, где $\kappa_0 = = m|\alpha|/\hbar^2$. Этот уровень соответствует частице, «связываемой» δ -ямой, $U = -|\alpha|\delta(x)$, сравнить с 2.7 (при этом наличие непроницаемых потенциальных стенок при $x = \pm a$ приводит к некоторому смещению такого « δ -ямого» уровня вверх, найти его предлагается читателю самостоятельно).

2.12. Решение у. Ш имеет вид $\Psi = A \sin k(x+a)$ при $-a \leq x < 0$ и $\Psi = B \sin k(x-b)$ при $0 < x < b$, где $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ и учтены граничные условия $\Psi(-a) = \Psi(b) = 0$. Сшивание решений при $x = 0$ (см. формулы (1, 2) из 2.6) приводит к соотношениям

$$A \sin ka = -B \sin kb, \quad B \cos kb - A \cos ka = \frac{2m\alpha}{k\hbar^2} A \sin ka,$$

из которых следует уравнение для спектра энергетических уровней частицы:

$$\sin k(a+b) = -(2m\alpha/k\hbar^2) \sin ka \cdot \sin kb \quad (1)$$

(при $b = a$ оно переходит в формулу (1) из 2.11).

Отметим некоторые свойства спектра.

1) В области значений E , для которых $m\alpha/k\hbar^2 \ll 1$, правая часть (1) мала и поэтому $k_n(a+b) \approx \pi(n+1)$, как и при «свободном» движении частицы в яме шириной $(a+b)$ (читателю предлагается уточнить результат, найдя сдвиг таких уровней под влиянием δ -потенциала, сравнить с формулой (2) из 2.11).

2) В противоположном случае, когда $m\alpha/k\hbar^2 \gg 1$, произведение синусов в (1) мало, так что либо $k_{n_1} \approx \pi(n_1+1)/a$, либо $k_{n_2} \approx \pi(n_2+1)/b$. При этом спектр представляет наложение спектров, соответствующих независимому движению частицы в ямах шириной a и b (δ -потенциал выступает как малопроницаемая «перегородка»).

2.13. При достаточно быстром⁴⁾ убывании $U(x)$ у.Ш. и его решение при $x \rightarrow \pm\infty$ принимают вид: $\Psi'' = 0$, $\Psi = A_{\pm} + B_{\pm}x$, т. е. решение является, вообще говоря, возрастающим. При произвольных значениях параметров потенциала не существует решения у.Ш., которое не возрастало бы как при $x \rightarrow +\infty$, так и при $x \rightarrow -\infty$ (точно так же, как не существует убывающего одновременно при $x \rightarrow \pm\infty$ решения у.Ш. при произвольном $E < 0$). Такие решения существуют только при *избранных* значениях параметров потенциала, отвечающих условиям появления новых (по счету) состояний д.с. при углублении потенциальной ямы.

Чтобы пояснить сказанное, рассмотрим самый верхний уровень E_n д.с. Его в.ф. $\Psi_n \propto \exp(-\kappa|x|)$ при $x \rightarrow \pm\infty$, где $\kappa = \sqrt{2m|E_n|/\hbar^2}$. При уменьшении глубины ямы все уровни смещаются вверх и при некоторых значениях параметров поля самый верхний из них принимает значение $E_n = 0$, при этом его в.ф. $\Psi_n = \text{const}$ при $x \rightarrow \pm\infty$, а число нулей в.ф. равно числу имеющихся состояний д.с. с $E < 0$. В качестве иллюстрации рассмотрим свободную частицу. У.Ш. имеет ограниченное решение $\Psi_{E=0} = \text{const}$, у которого отсутствуют нули. В соответствии с вышесказанным сколь угодно мелкая яма уже *связывает* частицу (сравнить с 2.3) и возникающее состояние д.с. является первым по счету.

а) Найдем сначала условие появления нового по счету состояния д.с. при углублении ямы. Не возрастающее при $x \rightarrow \pm\infty$ решение у.Ш. с $E = 0$ имеет вид: $\Psi = A$ при $x < 0$; $\Psi = B \cos(\gamma x + \delta)$ при $0 < x < a$ (область ямы), $\gamma = \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$; $\Psi = C$ при $x > a$. Непрерывность в.ф. и ее производной в точках 0 и a дают: $A = B$; $\delta = 0$; $\gamma a = \pi l$, где l — целое; $C = (-1)^l B$. Эта в.ф. имеет l нулей (аргумент косинуса изменяется от 0 до πl), так что условие $\gamma a = \pi l$ является условием появления $(l + 1)$ -го уровня. Отсюда следует, что число существующих в яме состояний д.с. $N_{св}$ определяется условием $\gamma a/\pi < N_{св} < \gamma a/\pi + 1$.

б) При $0 < \gamma a/\hbar^2 < 1$ — одно связанное состояние, при $\gamma a/\hbar^2 > 1$ — два.

⁴⁾ Требуется, чтобы потенциал убывал быстрее, чем $\propto 1/x^2$. В случае потенциала притяжения со степенным убыванием, $U \approx -\alpha/x^s$ при $x \rightarrow \infty$, с $s \leq 2$, решение у.Ш. для $E = 0$ имеет совершенно иную асимптотику, сравнить с 9.9 и 9.14. Физическая причина отмеченного различия состоит в том, что при медленном убывании потенциала притяжения число существующих в нем состояний д.с. бесконечно велико за счет сгущения уровней при $E_n \rightarrow 0$.

2.14. а) $\pi^{-1} \sqrt{2mU_0 a^2/\hbar^2} - 1/2 < N_{\text{св}} < \pi^{-1} \sqrt{2mU_0 a^2/\hbar^2} + 1/2$;

б) единственное связанное состояние появляется при $ma/\hbar^2 > 1/2$.

2.15. Состояниям д.с. отвечают $E < U_2$. Условие появления новых (или первого) состояний д.с. при углублении ямы можно получить из условия существования не возрастающего при $x \rightarrow \pm\infty$ решения у.Ш. с $E = U_2$ (сравнить с 2.13). Оно имеет вид

$$\operatorname{tg} \sqrt{2mU_2 a^2/\hbar^2} = \sqrt{U_1/U_2 - 1},$$

причем порядковый номер N уровня определяется условием

$$(N - 3/2)\pi < \sqrt{2mU_2 a^2/\hbar^2} < (N - 1/2)\pi.$$

Соответственно условие существования связанных состояний⁵⁾

$$\sqrt{2ma^2 U_2/\hbar^2} \geq \operatorname{arctg} \sqrt{(U_1 - U_2)/U_2}.$$

В частности, при $U_1 = \infty$ требуется, чтобы $U_2 \geq \pi^2 \hbar^2 / 8ma^2$; при $U_1 = U_2$ хотя бы одно состояние д.с. существует всегда.

2.16. Среднее значение силы, действующей со стороны частицы на правую яму, дается интегралом

$$\overline{(F_{\text{пр}})_{nn}} = \int_0^{\infty} (dU/dx) \Psi_n^2(x) dx.$$

Выполнив интегрирование по частям и воспользовавшись у.Ш., получаем

$$\overline{(F_{\text{пр}})_{nn}} = E_n \Psi_n^2(0) + \frac{\hbar^2}{2m} (\Psi_n'(0))^2. \quad (1)$$

Для четных состояний имеем $\Psi_n'(0) = 0$ и так как $E_n < 0$, то $\overline{(F_{\text{пр}})_{nn}} < 0$; для нечетных уровней $\Psi_n(0) = 0$ и $\overline{(F_{\text{пр}})_{nn}} > 0$, что и доказывает утверждение задачи⁶⁾.

2.17. В импульсном представлении $T = \beta^2/2m \equiv p^2/2m$ является оператором умножения, а \hat{U} является интегральным оператором с ядром $U(p, p')$, равным (см. 1.41)

$$U(p, p') \equiv \tilde{U}(p - p'), \quad \tilde{U}(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int U(x) \exp(-ipx/\hbar) dx. \quad (1)$$

⁵⁾ Подчеркнем, что для состояний д.с. $E_n \leq U_2$; при этом уровни E_n повышаются как при увеличении U_1 , так и при уменьшении a , см. 2.4.

⁶⁾ Отметим, что сила, действующая на левую яму, отличается от (1) знаком.

Таким образом, у. Ш в импульсном представлении имеет вид

$$\hat{H}\Phi(p) \equiv \frac{p^2}{2m} \Phi(p) + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{U}(p-p') \Phi(p') dp' = E\Phi(p). \quad (2)$$

В случае $U = -\alpha\delta(x)$ имеем $\tilde{U} = -\alpha/2\pi\hbar$ и уравнение (2) принимает вид

$$\frac{p^2}{2m} \Phi(p) - \frac{\alpha}{2\pi\hbar} C = E\Phi(p), \quad C = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(p) dp. \quad (3)$$

Отсюда ($E = -|E| < 0$)

$$\Phi(p) = \frac{m\alpha}{\pi\hbar} \frac{C}{p^2 + 2m|E|}. \quad (4)$$

Условие согласованности второго из выражений (3) и (4) дает

$$1 = \frac{m\alpha}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{p^2 + 2m|E|} = \frac{\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}}, \quad (5)$$

что представляет уравнение для спектра. Оно имеет (при $\alpha > 0$) только одно решение $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$. Этому уровню отвечает в. ф. (4), которая при $C = \sqrt{2\pi m\alpha/\hbar}$ нормирована на единицу, сравнить с 2.7.

2.18. В данной задаче $\tilde{U}(p) = -\alpha(e^{ipa/\hbar} + e^{-ipa/\hbar})/2\pi\hbar$ и у. Ш. принимает вид (см. предыдущую задачу)

$$\frac{p^2}{2m} \Phi(p) - \frac{\alpha}{2\pi\hbar} (e^{ipa/\hbar} C_+ + e^{-ipa/\hbar} C_-) = E\Phi(p), \quad (1)$$

где

$$C_{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\mp ipa/\hbar} \Phi(p) dp. \quad (2)$$

Отсюда, обозначив $\kappa^2 = -2mE/\hbar^2$, $\tilde{\alpha} = m\alpha/\hbar^2$, находим

$$\Phi(p) = \frac{\tilde{\alpha}\hbar}{\pi} (e^{ipa/\hbar} C_+ + e^{-ipa/\hbar} C_-) (p^2 + \hbar^2\kappa^2)^{-1}. \quad (3)$$

Подставив (3) в (2) и вычислив интегралы (см. Д1.3), получаем

$$C_+ = \frac{\tilde{\alpha}}{\kappa} (C_+ + e^{-2\kappa a} C_-), \quad C_- = \frac{\tilde{\alpha}}{\kappa} (e^{-2\kappa a} C_+ + C_-). \quad (4)$$

Условием существования нетривиального решения этой системы является выполнение одного из двух соотношений

$$\kappa = \tilde{\alpha} (1 \pm e^{-2\kappa a}), \quad (5)$$

которые и определяют энергетический спектр.

Первое из уравнений (5), отвечающее выбору знака (+), имеет один корень (при $\tilde{\alpha} > 0$). При его реализации из (4) следует $C_+ = C_-$, т. е. соответствующий уровень является *четным* (см. (3)). Энергия этого уровня при $\tilde{\alpha} a \ll 1$ равна $E_0^+ \approx \approx -2m\alpha^2/\hbar^2$ (две δ -ямы на близком расстоянии действуют как одна, но с удвоенным значением α , сравнить с 2.7). При $\tilde{\alpha} a \gg 1$ имеем

$$E_0^+ \approx - (m\alpha^2/2\hbar^2) (1 + e^{-2\tilde{\alpha}a})$$

(в этом случае экспоненциальное слагаемое в (5) мало, и пренебрегая им, получаем $\kappa_0^+ \approx \tilde{\alpha}$; подставив это значение в показатель экспоненты, приходим к более точному выражению для κ_0^+ , которое и использовано при вычислении E_0^+).

Второе из уравнений (5) определяет *нечетные* уровни. Единственный нечетный уровень имеется лишь при $\tilde{\alpha} a > 1/2$, сравнить с 2.13. Его энергия в момент появления (т. е. при $0 < < \tilde{\alpha} a - 1/2 \ll 1$) равна

$$E_1^- \approx (2\tilde{\alpha}a - 1)^2 \hbar^2/2m\alpha^2,$$

а при $\tilde{\alpha} a \gg 1$ находим

$$E_1^- \approx - (m\alpha^2/2\hbar^2) (1 - e^{-2\tilde{\alpha}a}).$$

При $a \rightarrow \infty$ оба уровня, четный и нечетный, сливаются в один уровень, существующий в одной изолированной δ -яме.

2.19. Ядро оператора O в импульсном представлении

$$U(p, p') = -\lambda g(p) g^*(p'),$$

$$g(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} f(x) dx \quad (1)$$

(сепарабельная, или факторизованная форма ядра оператора взаимодействия сохраняется, естественно, в любом представлении) и у. Ш, см. 2.17, принимает вид

$$\frac{p^2}{2m} \Phi(p) - \lambda g(p) \int_{-\infty}^{\infty} g^*(p') \Phi(p') dp' = E\Phi(p). \quad (2)$$

Отсюда

$$\Phi(p) = \frac{2m\lambda C}{p^2 - 2mE} g(p), \quad C = \int_{-\infty}^{\infty} g^*(p) \Phi(p) dp. \quad (3)$$

Условие согласованности этих выражений приводит к соотношению

$$2m\lambda \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|g(p)|^2}{p^2 - 2mE} dp = 1, \quad (4)$$

определяющему энергетический спектр связанных состояний частицы.

Рассмотрим следствия этого соотношения.

1. При $E < 0$ интеграл в (4) является монотонной положительной функцией $|E|$, равной нулю при $|E| = \infty$. Соответственно в случае $\lambda < 0$ уравнение не имеет корней (связанные состояния отсутствуют). Если $\lambda > 0$, то имеются две возможности:

а) $g(0) \neq 0$, так что интеграл в (4) при $E \rightarrow 0$ равен $+\infty$. В этом случае всегда имеется только одно связанное состояние. В пределе $\lambda \rightarrow 0$ также и $E_0 \rightarrow 0$; при этом в интеграле в (4) существенна область малых p , так что можно вынести за знак интеграла $|g(0)|^2$ и получить

$$E_0 \approx -2\pi^2 m \lambda^2 |g(0)|^4, \quad \lambda \rightarrow 0. \quad (5)$$

В другом предельном случае, $\lambda \rightarrow \infty$, также и $-E_0 \rightarrow \infty$, при этом

$$E_0 \approx -\lambda \int_{-\infty}^{\infty} |g(p)|^2 dp. \quad (6)$$

Заметим, что $|E_0(\lambda)|$ является монотонно возрастающей функцией параметра λ .

б) $g(0) = 0$, причем $\int_{-\infty}^{\infty} |g|^2 p^{-2} dp = A$. В этом случае при $\lambda > (2mA)^{-1}$ также имеется одно связанное состояние, а при $\lambda < (2mA)^{-1}$ их нет.

2. При $E > 0$ в случае сепарабельного потенциала может иметь место необычная ситуация, если $g(p_0) = 0$ для некоторого $p_0 \neq 0$, причем

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(p)|^2 (p^2 - p_0^2)^{-1} dp = B < \infty.$$

В этом случае при $\lambda = \lambda_0 = (2mB)^{-1}$ имеется связанное состояние частицы с энергией $\tilde{E}_0 = p_0^2/2m > 0$. Этот дискретный уровень находится непосредственно на фоне непрерывного спектра.

2.20. Решение уравнения для функции Грина G_E при $x < x'$ имеет вид $G_E = A(x') \exp[\kappa(x - x')] + B(x') \exp[-\kappa(x - x')]$, $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} > 0$. Условие убывания G_E при $x \rightarrow -\infty$ требует выбора $B(x') = 0$. Аналогично при $x > x'$ имеем $G_E = C(x') \exp(-\kappa(x - x'))$. В точке $x = x'$ функция G_E непрерывна, а производная G'_E имеет скачок, равный (сравнить с 2.6)

$$G'_E(x = x' + 0, x') - G'_E(x = x' - 0, x') = -2m/\hbar^2.$$

С учетом этих условий находим

$$G_E(x, x') = \frac{m}{\kappa \hbar^2} \exp(-\kappa|x - x'|). \quad (1)$$

С помощью функции Грина общее решение уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) - E\Psi(x) = f(x) \quad (2)$$

для $E < 0$ можно записать в виде

$$\Psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} + \int_{-\infty}^{\infty} G_E(x, x') f(x') dx'. \quad (3)$$

Если в (2) положим $f = -U(x)\Psi(x)$, то приходим к у. Ш., а его формальное решение (3) при этом является уравнением Шрёдингера в интегральной форме. Так как для физических приложений обычно представляют интерес решения у. Ш., не возрастающие при $x \rightarrow \pm\infty$, и так как при этом интегральное слагаемое в (3) убывает, то в (3) следует положить $A = B = 0$, так что у. Ш. в интегральной форме принимает вид

$$\Psi_E(x) = -\frac{m}{\kappa \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\kappa|x - x'|) U(x') \Psi_E(x') dx'. \quad (4)$$

Оно эквивалентно дифференциальному у. Ш. с учетом граничных условий — убывания $\Psi(x)$ при $x \rightarrow \pm\infty$, и имеет решение лишь при значениях $E < 0$, принадлежащих энергетическому спектру.

Для $U = -\alpha\delta(x)$ уравнение (4) принимает вид

$$\Psi_E(x) = \frac{\alpha m}{\kappa \hbar^2} \Psi_E(0) \exp(-\kappa|x|),$$

непосредственно определяющий в. ф. и энергию $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$ единственного уровня д. с. в δ -потенциале.

Отметим, что функцию Грина можно рассматривать как линейный оператор G_E , ядро которого в координатном представ-

лени имеет вид $G_E(x, x')$. При этом из уравнения для $G_E(x, x')$ следует т

$$(\hat{H} - E) \hat{G}_E = \hat{1}, \quad \hat{H} = \hat{p}^2/2m. \quad (5)$$

Это операторное уравнение справедливо в произвольном представлении. Его формальное решение имеет вид $\hat{G}_E = (\hat{H} - E)^{-1}$. В импульсном представлении $G_E = (p^2/2m - E)^{-1}$ является оператором умножения. Используя результат задачи 1.41, находим его ядро в координатном представлении

$$G_E(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ip(x-x')/\hbar} dp}{2\pi\hbar(p^2/2m + |E|)} = \frac{m}{\kappa\hbar^2} e^{-\kappa|x-x'|},$$

что совпадает с (1), значение интеграла — см. Д1.3.

2.21. У.Ш. в интегральной форме в случае сепарабельного потенциала принимает вид

$$\Psi_E(x) = \frac{\lambda m}{\kappa\hbar^2} \int \exp(-\kappa|x-x'|) f(x') f^*(x'') \Psi_E(x'') dx' dx''. \quad (1)$$

Обозначив

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \Psi_E(x) dx, \quad (2)$$

из (1) сразу находим вид в. ф.

$$\Psi_E(x) = \frac{\lambda m C}{\kappa\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\kappa|x-x'|) f(x') dx'. \quad (3)$$

При этом условии согласованности выражений (2) и (3)

$$\kappa = \frac{\lambda m}{\hbar^2} \iint_{-\infty}^{\infty} f(x') f^*(x) \exp(-\kappa|x-x'|) dx dx' \quad (4)$$

определяет спектр. Отсюда в предельных случаях следует:

а) При $\lambda \rightarrow 0$ также и $\kappa \rightarrow 0$; можно заменить экспоненту в (4) единицей и получить для единственного уровня д. с. ($\lambda > 0$)

$$E_0 \approx -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2} \left| \int f(x) dx \right|^4. \quad (5)$$

б) При $\lambda \rightarrow \infty$ также и $\kappa \rightarrow \infty$. В интеграле (4) при этом существенна область переменных $x' \approx x$. Положив $f(x') \approx f(x)$ и вычислив получающийся интеграл по x' , находим

$$E_0 \approx -\lambda \int |f(x)|^2 dx. \quad (6)$$

Для более полного анализа (4) удобно преобразовать это выражение, воспользовавшись формулой Д1.3. Возникающее соотношение воспроизводит формулу (4) из задачи 2.19, к которой мы и отсылаем читателя.

2.22. Рассмотрим $\Psi_0(x)$ — в. ф. основного состояния с $E_0 < 0$ ($|E_n| \leq |E_0|$). Эта функция не имеет нулей при конечных x и $\Psi_0(x) > 0$ (этому условию можно удовлетворить соответствующим выбором фазового множителя). Функция $\Psi_0(x)$ удовлетворяет интегральному уравнению — уравнению (4) задачи 2.20. Возьмем в этом уравнении $x = x_0$, где x_0 — точка максимума $\Psi_0(x)$:

$$\Psi_0(x_0) = \frac{m}{\kappa_0 \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\kappa_0 |x_0 - x'|} |U(x')| \Psi_0(x') dx'. \quad (1)$$

Замечаем, что подынтегральная функция здесь — неотрицательная и замена $\exp(-\kappa_0 |x_0 - x'|) \Psi_0(x')$ на $\Psi_0(x_0)$ может только увеличить правую часть. После сокращения на $\Psi_0(x_0)$ получаем

$$1 \leq \frac{m}{\kappa_0 \hbar^2} \int |U(x)| dx.$$

Отсюда и следует

$$|E_n| \leq |E_0| = \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} \leq \frac{m}{2\hbar^2} \left[\int U(x) dx \right]^2. \quad (2)$$

Приблизительно равенство (2) имеет место для «мелких» потенциальных ям, в связи с данной задачей см. также 2.23.

2.23. Воспользуемся интегральной формой у. Ш. — уравнением (4) задачи 2.20. Умножим обе части уравнения на $U(x)$ и проинтегрируем в бесконечных пределах. В получающихся интегралах существенную роль играют $x, x' \sim a$, и так как $\kappa a \ll 1$, то можно разложить экспоненту, ограничиваясь первыми двумя членами. Таким образом получаем

$$\int U(x) \Psi(x) dx \approx -\frac{m}{\kappa \hbar^2} \iint (1 - \kappa |x - x'|) \times \\ \times U(x) U(x') \Psi(x') dx dx'$$

Отсюда, с рассматриваемой точностью,

$$\kappa \approx -\frac{m}{\hbar^2} \int U(x) dx \left\{ 1 + \frac{\frac{m}{\hbar^2} \iint |x - x'| U(x) U(x') \Psi(x') dx dx'}{\int U(x) \Psi(x) dx} \right\}.$$

В поправочном члене (второе слагаемое в скобках) можно пренебречь изменением в. ф. в области интегрирования, заменив ее

на $\Psi(0)$, и получить уточненное значение κ (а тем самым и энергии $E_0 = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$):

$$\kappa = -\frac{m}{\hbar^2} \int U(x) dx - \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^2 \iint |x-x'| U(x) U(x') dx dx' \quad (1)$$

(поправка всегда отрицательна в согласии с предыдущей задачей).

2.24. Функцию Грина можно получить из решения уравнения как в 2.20. Однако, имея в виду результат этой задачи, на основании соображений, аналогичных используемым при решении электростатических задач *методом изображений*, ответ можно написать сразу:

$$G_E(x, x') = \frac{m}{\kappa \hbar^2} [\exp(-\kappa|x-x'|) - \exp(-\kappa|x+x'|)]. \quad (1)$$

У. Ш. в интегральной форме, автоматически учитывающее граничные условия $\Psi(0) = \Psi(\infty) = 0$, записывается в виде (сравнить с 2.20)

$$\Psi(x) = - \int_0^{\infty} G_E(x, x') \tilde{U}(x') \Psi(x') dx'. \quad (2)$$

2.25. Идея доказательства точно такая же, как и в 2.22. Укажем оценку экспоненциальных слагаемых в у. Ш. (см. предыдущую задачу), входящих в функцию Грина. Так как $|x+x'| - |x-x'| \leq 2x'$ (напомним, что $x, x' \geq 0$), то

$$\begin{aligned} 0 &\leq \exp(-\kappa|x-x'|) - \exp(-\kappa|x+x'|) = \\ &= \exp(-\kappa|x-x'|) [1 - \exp(-\kappa|x+x'| + \kappa|x-x'|)] \leq \\ &\leq \exp(-\kappa|x-x'|) [1 - \exp(-2\kappa x')] \leq 2\kappa x'. \end{aligned}$$

Теперь утверждение задачи представляется очевидным.

Для прямоугольной потенциальной ямы необходимое условие существования состояний д. с. принимает вид $U_0 m a^2 / \hbar^2 \geq 1$, а точное условие: $U_0 m a^2 / \hbar^2 \geq \pi^2 / 8 \approx 1,24$. Для δ -ямы необходимое условие $2 m a a / \hbar^2 \geq 1$ совпадает с точным.

2.26. Уравнение для $G_E(x, x')$ и его решение имеют вид

$$-(\hbar^2/2m) (d^2/dx^2) G_E(x, x') - E G_E(x, x') = \delta(x-x'),$$

$$G_E = \begin{cases} A(x') \sin \kappa x, & 0 \leq x < x', \\ B(x') \sin \kappa(x-a), & x' < x \leq a. \end{cases}$$

Здесь учтены граничные условия: $G_E = 0$ при $x = 0$ и $x = a$. Условия сшивания $G_E(x, x')$ в точке $x = x'$, совершенно аналогичные отмеченным в задаче 2.20, позволяют найти A и B

и окончательное выражение для функции Грина:

$$G_E(x, x') = -2m \sin[\kappa(x+x' - |x'-x|)/2] \times \\ \times \frac{\sin[\kappa(x+x'+|x'-x|-2a)/2]}{\kappa \hbar^2 \sin \kappa a}.$$

Отсюда видно, что G_E является аналитической функцией E

($\kappa = \sqrt{2mE/\hbar^2}$), имеющей следующие особые точки:

а) точка $E = \infty$ — существенно особая точка;

б) точки $E_n = \hbar^2 \kappa_n^2 / 2m$, где $\kappa_n a = (n+1)\pi$, $n=0, 1, \dots$, являющиеся полюсами G_E ; при этом положения полюсов совпадают с уровнями частицы в яме (точка $E=0$ является устранимой особой точкой).

2.27. а) Ответом на вопрос является результат задачи 2.22: самый глубокий уровень — в δ -яме $U = -\alpha\delta(x-x_0)$.

б) Максимальное число уровней д.с. в условиях задачи равно бесконечности за счет их возможного сгущения при $E \rightarrow 0$, которое имеет место для потенциалов, убывающих при $x \rightarrow \pm\infty$ как $U \approx -\tilde{\alpha}|x|^{-\nu}$ с $\tilde{\alpha} > 0$ и $0 < \nu < 2$ (см. [1], § 18). При $1 < \nu < 2$ такие потенциалы удовлетворяют условиям задачи.

2.28. $\Psi_E(x) = A(E) \sin(\sqrt{2mE/\hbar^2} x)$ (учтено, что $\Psi_E(0) = 0$). Для нормировки этих функций на $\delta(E-E')$ следует выбрать $A(E) = (2m/\pi^2 \hbar^2 E)^{1/4}$. Условие полноты этой системы функций

$$\int_0^{\infty} \Psi_E^*(x) \Psi_E(x') dE = \delta(x-x')$$

легко установить, если воспользоваться соотношением Д1.1.

2.29. Решение у. Ш., описывающее отражение и прохождение частиц с $E > U_0$, падающих на стенку слева, имеет вид

$$\Psi_k^+(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A(k) e^{-ikx}, & x < 0 \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \\ B(k) e^{ik'x}, & x > 0 \quad (k' = \sqrt{2m(E-U_0)/\hbar^2} > 0) \end{cases}$$

Из непрерывности Ψ_k^+ и $\Psi_k^{(+)}$ в точке $x=0$ следует

$$1 + A = B, \quad k(1 - A) = k'B; \quad A(k) = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad B(k) = \frac{2k}{k + k'}.$$

Таким образом ($R = |A|^2$, $D = k'|B|^2/k$):

$$R(E) = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0}} \right)^2, \quad D(E) = \frac{4\sqrt{E(E-U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0})^2}. \quad (1)$$

Как и следует, $R(E) + D(E) = 1$, при этом

$$a) R(E) \approx U_0^2/16E^2 \rightarrow 0 \text{ при } E \rightarrow \infty;$$

$$b) D(E) \approx 4\sqrt{(E-U_0)/U_0} \approx \sqrt{E-U_0} \rightarrow 0 \text{ при } E \rightarrow U_0.$$

2.30. В. ф. имеет вид $\Psi_k^+ = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}$ при $x < 0$ и $\Psi_k^+ = B(k)e^{ikx}$ при $x > 0$ (здесь $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$, падающие частицы движутся слева направо). Сшивание Ψ_k^+ и $\Psi_k^{(+)}$ в точке $x = 0$ (см. соотношения (2) из 2.6) дает

$$1 + A = B, \quad ik(B - 1 + A) = 2maB/\hbar^2;$$

$$A(k) = \frac{ma}{ikh^2 - ma}, \quad B(k) = \frac{ikh^2}{ikh^2 - ma}. \quad (1)$$

Коэффициенты отражения $R(E) = |A|^2$ и прохождения $D(E) = |B|^2$ удовлетворяют, как и следует, соотношению $R + D = 1$. При этом

$$a) R(E) \approx ma^2/2E\hbar^2 \rightarrow 0 \quad \text{при } E \rightarrow \infty;$$

$$b) D(E) \approx 2E\hbar^2/ma^2 \approx E \rightarrow 0 \quad \text{при } E \rightarrow 0.$$

Так как $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, то из (1) следует, что $A(E)$ и $B(E)$ являются аналитическими функциями E , имеющими особые точки:

а) точки $E = 0$ и $E = \infty$ — корневые точки ветвления; б) полюс в точке E_0 , определяемой условием $i\sqrt{2mE_0} = ma/\hbar$.

Из-за наличия точек ветвления функции $A(E)$ и $B(E)$ являются многолиственными (в данном случае — двухлиственными). Для однозначного определения их проведем в плоскости комплексной

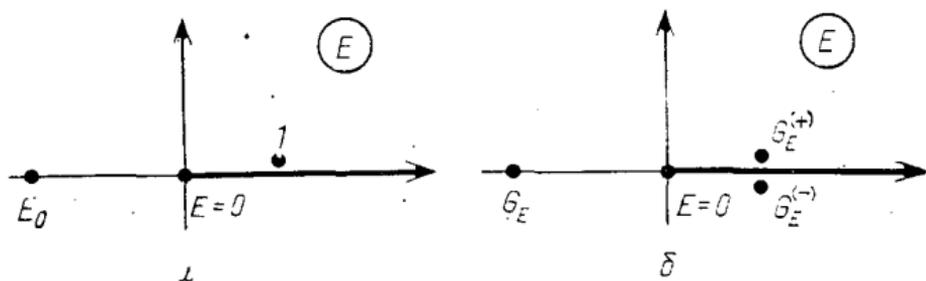


Рис. 30

переменной E разрез вдоль вещественной полуоси $E > 0$, см. рис. 30, а. Так как на физическом листе фаза точек, непосредственно примыкающих к верхнему берегу разреза (точки типа 1 на рисунке), равна нулю и при этом $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$, то в этих точках значения аналитических функций $A(E)$ и $B(E)$ совпадают со значениями физических амплитуд $A(E)$ и $B(E)$. Далее, фаза точек E на отрицательной полуоси $E < 0$ физического листа равна π и для них $\sqrt{E} = i|\sqrt{E}|$. Соответственно полюс E_0 амплитуд при $\alpha < 0$ (δ -яма) находится на физическом листе, а значение E_0 совпадает с энергией единственного

уровня д. с. в яме. В случае барьера, $\alpha > 0$, связанные состояния отсутствуют, а полюс амплитуд при этом находится на нефизическом листе (фаза E_0 равна 3π). Такие полюса отвечают, как принято говорить, *виртуальным* уровням.

2.31. Приведем выражения для коэффициента прохождения

$$D(E) = \begin{cases} \frac{4E(E - U_0)}{4E(E - U_0) + U_0^2 \sin^2 \sqrt{2m(E - U_0)} a^2 / \hbar^2}, & E > U_0, \\ \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \operatorname{sh}^2 \sqrt{2m(U_0 - E)} a^2 / \hbar^2}, & E < U_0. \end{cases}$$

Первое из них при $U_0 < 0$ описывает $D(E)$ в случае потенциальной ямы, при этом $|U_0|$ — ее глубина.

Отметим, что $D(E) \rightarrow 1$ при $E \rightarrow \infty$ (естественный физический результат). С другой стороны, $D(E) \propto E \rightarrow 0$ при $E \rightarrow 0$. Такое свойство $D(E)$ — общий квантовомеханический результат (см. задачу 2.39). Однако для потенциальной ямы в исключительных случаях, когда

$$\sqrt{2m|U_0|} a^2 / \hbar^2 = n\pi, \quad n - \text{целое},$$

указанная зависимость нарушается (при этом $D(E) \rightarrow 1$ при $E \rightarrow 0$). Выделенность этих случаев определяется тем обстоятельством, что при таких значениях параметров ямы в ней появляются новые состояния д. с. при ее углублении (см. 2.13).

2.32. Значения E , при которых частицы не отражаются от барьера, являются корнями уравнения

$$\operatorname{tg} ka = -k\hbar^2 / \alpha m; \quad k = \sqrt{2mE / \hbar^2} > 0.$$

Укажем, что при решении у. Ш. в асимптотике (II.4) в. ф. следует опустить член, соответствующий отраженным частицам, т. е. сразу положить $A = 0$, и в точках $x = 0$ и $x = a$ воспользоваться условиями сшивания, установленными в задаче 2.6.

2.33. Рассмотрим для определенности случай, когда $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow -\infty$ и $U(x) \rightarrow U_0$ при $x \rightarrow +\infty$. Обозначим $\Psi_-(x)$ и $\Psi_+(x)$ в. ф. стационарных состояний с одинаковой энергией, но с противоположными направлениями движения падающих частиц в область действия потенциала. Они имеют следующие асимптотики:

$$\Psi_+ \approx \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \quad (k = \sqrt{2mE / \hbar^2}), \\ B(k)e^{ik_1x}, & x \rightarrow +\infty \quad (k_1 = \sqrt{2m(E - U_0) / \hbar^2}), \end{cases}$$

$$\Psi_- \approx \begin{cases} \bar{B}(k)e^{-ikx} & x \rightarrow -\infty, \\ e^{-ik_1x} + \bar{A}(k)e^{ik_1x}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (1)$$

и удовлетворяют у. Ш. $-(\hbar^2 / 2m) \Psi''_{\pm} + U(x) \Psi_{\pm} = E \Psi_{\pm}$.

Умножив уравнение для Ψ_+ слева на Ψ_- , а уравнение для Ψ_- на Ψ_+ и вычитая их почленно, находим после простых преобразований

$$\Psi_-(x) \Psi'_+(x) - \Psi_+(x) \Psi'_-(x) = \text{const.} \quad (2)$$

Вычислив левую часть (2) при $x \rightarrow \pm\infty$ с помощью асимптотик (1) и приравняв результаты, получаем $k\bar{B} = k_1B$. Отсюда и следует

$$D_+(E) = (k_1/k) |B|^2 = (k/k_1) |\bar{B}|^2 = D_-(E).$$

2.34. Удобно исходить из интегральной формы у.Ш. (см. 2.42), имеющей для сепарабельного потенциала вид ($k = |p|/\hbar$)

$$\Psi_p^+(x) = e^{ipx/\hbar} + \frac{im\lambda}{k\hbar^2} \iint e^{ik|x-x'|} f(x') f^*(x'') \Psi_p^+(x'') dx' dx''.$$

Отсюда

$$\Psi_p^+(x) = \exp(ipx/\hbar) + (im\lambda C(p)/k\hbar^2) \varphi_k(x), \quad (1)$$

где

$$C(p) = \int f^*(x) \Psi_p^+(x) dx, \quad \varphi_k(x) = \int e^{ik|x-x'|} f(x') dx'. \quad (2)$$

При этом условии согласованности выражений (1) и (2) дает

$$C(p) = g^*(p) \left[1 - (i\lambda m/k\hbar^2) \iint f^*(x) f(x') e^{ik|x-x'|} dx dx' \right]^{-1},$$

$$g(p) = \int f(x) \exp(-ipx/\hbar) dx. \quad (3)$$

Соотношения (1), (2) и (3) полностью определяют в.ф. Переходя к ее асимптотикам при $x \rightarrow \pm\infty$, находим амплитуды прошедшей $B(p)$ и отраженной $A(p)$ волн:

$$B(p) = 1 + (i\lambda m/k\hbar^2) C(p) g(p), \quad D(p) = |B(p)|^2,$$

$$A(p) = (i\lambda m/k\hbar^2) C(p) g(-p), \quad R(p) = |A(p)|^2 \quad (4)$$

(эти формулы справедливы как при $p > 0$, так и при $p < 0$).

Произведем некоторые преобразования в полученных результатах (4). Прежде всего, воспользовавшись формулой (Д1.3) и соотношением (Д1.2):

$$\int \frac{F(x) dx}{x - x_0 - i\epsilon} = \int \frac{F(x) dx}{x - x_0} + i\pi F(x_0) \quad (5)$$

(\int означает интеграл в смысле главного значения, $\epsilon > 0$ бесконечно мало), преобразуем (3) к виду

$$C(p) = g^*(p) [C_1(p)/2p\hbar - iC_2(p)/2k\hbar^2]^{-1},$$

где

$$C_1(p) = 2p\hbar \left(1 - \frac{\lambda m}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|g(x)|^2 dx}{x^2 - p^2} \right),$$

$$C_2(p) = \lambda m (|g(p)|^2 + |g(-p)|^2).$$

После этого из (4) получаем

$$D(p) = \frac{C_1^2(p) + \lambda^2 m^2 (|g(p)|^2 - |g(-p)|^2)^2}{C_1^2(p) + C_2^2(p)},$$

$$R(p) = \frac{4\lambda^2 m^2 |g(p)g(-p)|^2}{C_1^2(p) + C_2^2(p)}. \quad (6)$$

Отсюда непосредственно следует:

1) $D(p) + R(p) = 1$,

2) $D(p) = D(-p)$, т. е. коэффициент прохождения для частиц, движущихся слева и справа, одинаков,

3) при $E \rightarrow \infty$ имеем $R(E) \approx (\lambda m/\hbar p)^2 |g(p)g(-p)|^2 \rightarrow 0$,

4) при $E \rightarrow 0$ также и $D(E) \rightarrow 0$ (сравнить с 2.39).

2.35. В. ф. при $x < 0$ имеет вид $\Psi_k^+ = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}$

(падающие частицы движутся слева направо, $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$).

При $x > 0$ заменой переменной

$$z = \xi(x/a - 1 + E/U_0), \quad \text{где } \xi = (2ma^2U_0/\hbar^2)^{1/3},$$

у. Ш. приводится к уравнению $\Psi_k^{(+)\prime\prime} + z\Psi_k^+ = 0$. Решение его, имеющее при $x \rightarrow +\infty$ вид уходящей направо волны, следует выбрать в виде

$$\Psi_k^+ = C(E) [\text{Bi}(-z) + i \text{Ai}(-z)] \underset{z(x) \rightarrow \infty}{\approx} \underset{z(x) \rightarrow \infty}{\approx} C(E) \pi^{-1/2} z^{-1/4} \exp \left[\frac{2i}{3} z^{3/2} + \frac{i\pi}{4} \right],$$

где $\text{Ai}(z)$ и $\text{Bi}(z)$ — функции Эйри. Из условий непрерывности в. ф. и ее производной в точке $x = 0$ находим A и C . При этом

$$C(E) = 2 [\text{Bi}(-z_0) + i \text{Ai}(-z_0) + i (\xi/ka) (\text{Bi}'(-z_0) + i \text{Ai}'(-z_0))]^{-1}, \quad (1)$$

где $z_0 = \xi(E/U_0 - 1)$.

Вычислив плотность потока частиц, $j = (\hbar/2mi)(\Psi^*\Psi' - \Psi\Psi^*)$, при $x \rightarrow +\infty$: $j_{\text{прош}} = \hbar\xi |C|^2/\pi ma$, и учтя, что для падающих частиц $j_{\text{пад}} = \hbar k/m$, находим коэффициент прохождения

$$D = j_{\text{прош}}/j_{\text{пад}} = \xi |C(E)|^2/\pi ka. \quad (2)$$

Формулы (1) и (2) решают задачу. Отметим частные случаи.

1) $E < U_0$, причем $\xi(1 - E/U_0) \gg 1$ (и $\xi \gg 1$)

$$D(E) \approx \frac{4 \sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \exp \left[-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2ma^2(U_0 - E)^3}{\hbar^2 U_0^2}} \right] \ll 1. \quad (3)$$

(при этом следует воспользоваться асимптотикой наиболее существенного в (1) слагаемого $i(\xi/ka)\text{Bi}'(-z_0)$, см. [34]).

2) $E > U_0$, причем $\xi(E/U_0 - 1) \gg 1$ (при этом $ka \gg \xi$),

$$D(E) \approx 4 \sqrt{E(E - U_0)} / (\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0})^2. \quad (4)$$

3) При $E \rightarrow 0$

$$D(E) \approx 4ka \{ \pi \xi [(\text{Bi}'(\xi))^2 + (\text{Ai}'(\xi))^2] \}^{-1} \propto \sqrt{E} \rightarrow 0.$$

2.36. В. ф. имеет вид

$$\Psi^+(x) = \begin{cases} [\text{Bi}(z_1) - i \text{Ai}(z_1)] + a(E) [\text{Bi}(z_1) + i \text{Ai}(z_1)], & x < 0, \\ b(E) [\text{Bi}(-z_2) + i \text{Ai}(-z_2)], & x > 0, \end{cases}$$

где $z_{1,2} = \xi(x \mp E/F_0)$, $\xi = (2mF_0/\hbar^2)^{1/3}$. Она записана в таком виде, где каждое слагаемое в квадратных скобках на больших расстояниях описывает распространяющуюся в соответствующем направлении волну; при этом $a(E)$ и $b(E)$ являются амплитудами отраженной и прошедшей волн, так что $R = |a(E)|^2$, $D = |b(E)|^2$ (сравнить с предыдущей задачей). Условия непрерывности Ψ^+ и $\Psi^{(+)}$ позволяют найти $a(E)$ и $b(E)$. В частности,

$$b(E) = -i \{ \pi (\text{Bi}(\eta) + i \text{Ai}(\eta)) (\text{Bi}'(\eta) + i \text{Ai}'(\eta)) \}^{-1},$$

где $\eta = -\xi E/F_0$ (при этом учтено значение вронскиана $\mathcal{W}\{\text{Ai}(z), \text{Bi}(z)\} = 1/\pi$).

Используя асимптотики функций Эйри [34], нетрудно получить следующие выражения для $D = |b(E)|^2$:

1) при $E < 0$, когда $\xi|E|/F_0 \gg 1$,

$$D(E) \approx \exp \left\{ -\frac{8}{3} (2m|E|^3/F_0^2 \hbar^2)^{1/2} \right\}, \quad (1)$$

2) при $E > 0$, когда $\xi E/F_0 \gg 1$,

$$D(E) \approx 1 - F_0^2 \hbar^2 / 32mE^3, \quad (2)$$

3) $D(E=0) = 3/4$, $R(E=0) = 1/4$.

2.37. В. ф. при $x \rightarrow \pm\infty$ имеет вид

$$\Psi^+(x) \approx \begin{cases} e^{ikx} + A(k) e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2}), \\ B(k) e^{ik_1 x}, & x \rightarrow +\infty \quad (k_1 = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}), \end{cases}$$

при этом коэффициент прохождения $D(E) = (k_1/k) |B(k)|^2$. При $E \rightarrow U_0$ имеем $k_1 \rightarrow 0$, $B(k_1) \rightarrow B(0) \neq 0$ и соответственно $D(E) \propto \propto (E - U_0)^{1/2} \rightarrow 0$, сравнить с 2.29.

2.38. Вне области действия потенциала в. ф. имеет вид

$$\Psi_k^+(x) \approx \begin{cases} e^{ikx} + A(k) e^{-ikx}, & x < -a, \\ B(k) e^{ikx}, & x > a. \end{cases} \quad (1)$$

В области же $|x| \leq a$ из у. Ш. $\Psi'' = (2mU(x)/\hbar^2 - k^2)\Psi$ в условиях задачи следует, что приближенно $\Psi_k^+ \approx C_1 + C_2x$ (действительно, так как $\Psi'' \sim \Psi/a^2$, то у. Ш. в первом приближении для слабого поля при $ka \ll 1$ принимает вид $\Psi'' = 0$). Сшивание этого решения с (1) дает $C_2 \approx 0$ и $C_1 \approx B \approx 1 + A$. Отсюда следует, что выражения (1), дающие $\Psi_k^+ \approx \text{const}$ при $|x| < a$, приближенно справедливы при всех значениях x . Учитывая это обстоятельство, проинтегрируем у. Ш. по x в пределах от $-b$ до b , где $b \gg a$. Так как при этом

$$\int_{-b}^b \Psi''(x) dx = ikBe^{ikb} - ike^{-ikb} + ikAe^{ikb},$$

$$\int_{-b}^b U(x) \Psi(x) dx \approx B \int_{-b}^b U(x) dx \approx B \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx,$$

$$\begin{aligned} \int_{-b}^b \Psi(x) dx &\approx B \int_0^b e^{ikx} dx + \int_{-b}^0 (e^{ikx} + Ae^{-ikx}) dx = \\ &= ik^{-1} \{A + B - 1 - (A + B) e^{ikb} + e^{-ikb}\}, \end{aligned}$$

то такое интегрирование приводит к соотношению

$$ik(A + B - 1) = 2maB/\hbar^2, \quad a = \int U(x) dx.$$

Отсюда, с учетом условия $1 + A = B$, следует

$$A \approx -ima(\hbar^2k + ima)^{-1}, \quad B \approx \hbar^2k(\hbar^2k + ima)^{-1}.$$

Полученный результат весьма нагляден, так как он означает, что в условиях задачи отражение частиц происходит так же, как и в случае δ -потенциала $\bar{U} = \alpha\delta(x)$ с $\alpha = \int U(x) dx$ (см. 2.30).

2.39. В выражениях для асимптотик в. ф.: $\Psi_k^+ \approx e^{ikx} + A(k) e^{-ikx}$ (при $x < 0$, $|x| \gg a$), $\Psi_k^+ = B(k) e^{ikx}$ (при $x \gg a$),

перейдем к пределу $k \rightarrow 0$:

$$\Psi_k^+ = \begin{cases} 1 + A(k) + ikx(1 - A(k)), & x < 0, |x| \gg a, \\ B(k)(1 + ikx), & x \gg a. \end{cases} \quad (1)$$

Рассмотрим теперь решение у.Ш. для $E = 0$, удовлетворяющее граничному условию $\Psi_{E=0}(+\infty) = 1$. При $x \rightarrow -\infty$ это решение имеет вид $\Psi_{E=0} = bx + d$, где постоянные b, d определяются конкретным видом потенциала. Сравнивая (1) с приведенными выражениями для $\Psi_{E=0}$, находим $ik(1 - A) \approx bB$, $1 + A \approx dB$. Отсюда $A \approx -1$, $B \approx 2ik/b$, так что ⁷⁾ при $E \rightarrow 0$

$$D(E) = |B|^2 \approx 8mE/b^2\hbar^2 \propto E. \quad (2)$$

Полученный результат теряет силу при $b = 0$. В этом исключительном случае у.Ш. для $E = 0$ имеет решение, которое не возрастает как при $x \rightarrow +\infty$, так и $x \rightarrow -\infty$. Такая ситуация может иметь место только в том случае, когда при малейшем углублении потенциала в нем возникает новое по счету состояние дискретного спектра (см. 2.13).

Для потенциала из задачи 2.31 имеем: $\Psi_{E=0} = 1$ при $x > a$; $\Psi_{E=0} = \text{ch}(\xi(x - a))$ при $0 < x < a$ (здесь $\xi = \sqrt{2ma^2U_0/\hbar^2}$), $\Psi_{E=0} = \text{ch}\xi a - (\xi \text{sh}\xi a)x$ при $x < 0$, так что $b = -\xi \text{sh}\xi a$ и $D(E) \approx (4E/U_0) \text{sh}^{-2}\xi a$ при $E \rightarrow 0$, что совпадает с результатом точного решения (для перехода к потенциальной яме следует под $U_0 > 0$ понимать ее глубину и заменить $\text{sh}\xi a$ на $\sin\xi a$).

2.40. У.Ш. для $E = 0$ принимает вид

$$\omega''(z) + \xi^2\omega(z) = 0, \quad \text{где} \quad \xi = \sqrt{1 + 2ma^2U_0/\hbar^2}.$$

Теперь не представляет труда найти в.ф. $\Psi_{E=0}(x)$, удовлетворяющую граничному условию $\Psi_{E=0}(+\infty) = 1$:

$$\Psi_{E=0} = (\sqrt{x^2 + a^2}/\xi a) \sin(\xi(\pi/2 - \text{arctg} x/a)). \quad (1)$$

Так как $\Psi_{E=0} \approx -x \sin(\pi\xi)/\xi a$ при $x \rightarrow -\infty$, то согласно предыдущей задаче находим для медленных частиц $D(E) \approx \approx 8m(\xi a)^2 E/\hbar^2 \sin^2 \pi\xi$. Это выражение неприменимо при $\pi\xi = \pi N$ (N — целое), или

$$2ma^2U_0/\hbar^2 = N^2 - 1. \quad (2)$$

Условие (2) определяет значения параметров потенциальной ямы, соответствующих появлению нового, N -го по счету уровня д. с., при ее углублении.

⁷⁾ Формула (2), как и асимптотики (1) в.ф., справедлива в случае потенциалов, убывающих при $x \rightarrow \pm\infty$ быстрее, чем $\infty 1/|x|^3$.

Отметим, что для перехода от ямы к барьеру в полученном выражении для $D(E)$ следует под $-U_0$ понимать его высоту и заменить $\xi^2 \sin^{-2} \pi \xi$ на $-\xi^2 \operatorname{sh}^{-2} \pi |\xi|$ при $\xi^2 < 0$.

2.41. У. Ш. в импульсном представлении и его решение, нормированное на δ -функцию от энергии, имеют вид

$$\begin{aligned} (p^2/2m) \Phi_E(p) - i\hbar F_0 \Phi'_E(p) &= E \Phi_E(p), \\ \Phi_E(p) &= (2\pi\hbar F_0)^{-1/2} \exp \left[-ip^3/6m\hbar F_0 + iEp/\hbar F_0 \right]. \end{aligned}$$

Значения E , для которых соответствующая в. ф. в координатном представлении удовлетворяет условию $\Psi_E(x=0) = 0$, или

$$\begin{aligned} \Psi_E(x=0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_E(p) dp = \\ &= C \int_0^{\infty} \cos(Ep/\hbar F_0 - p^3/6m\hbar F_0) dp = 0, \end{aligned}$$

определяют энергетический спектр для потенциала из задачи 2.8 (совпадение результатов при этом следует из интегрального представления для функции Эйри; отметим, что для таких связанных состояний $\Phi_E(p)$ уже не является в. ф. в импульсном представлении, сравнить с 4.15).

2.42. Имея в виду результат задачи 2.20, в которой была найдена функция Грина $G_E(x, x')$ при $E < 0$, замечаем, что искомые функции G_E^\pm при $E > 0$ могут быть получены непосредственно из выражения (1) указанной задачи, если в нем положить

$$x = \sqrt{-2mE/\hbar^2} = \mp ik, \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0,$$

т. е.

$$G_E^\pm(x, x') = \pm \frac{im}{\hbar^2 k} \exp(\pm ik|x - x'|). \quad (1)$$

Отметим, что функции Грина G_E^\pm при $E > 0$ и G_E при $E < 0$ можно рассматривать как различные граничные значения единой аналитической функции комплексной переменной E

$$\tilde{G}_E = i \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2 E}} \exp \left[i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} |x - x'| \right].$$

Точка $E = 0$ для нее является точкой ветвления. Проведя разрез вдоль вещественной полуоси плоскости E от $E = 0$ направо, как на рис. 30б, замечаем, что на верхнем берегу разреза на физическом листе (см. по этому поводу задачу 2.30) функция \tilde{G}_E совпадает с G_E^+ , на нижнем берегу разреза — с G_E^- , а на полуоси вещественных отрицательных значений — с G_E из задачи 2.20. Отметим также, что на физическом листе $|\tilde{G}_E| \rightarrow 0$ при $|E| \rightarrow \infty$ вдоль любого направления.

Функции Грина $G_E^\pm(\rho, \rho')$ в импульсном представлении имеют вид

$$G_E^\pm(\rho, \rho') = \delta(\rho - \rho') / (\rho^2/2m - E \mp i\varepsilon) \quad (2)$$

(сравнить с 2.20), здесь $\varepsilon > 0$ — бесконечно малая величина.

Дифференциальное у.Ш. с граничными условиями вида (II.4), соответствующими процессу прохождения и отражения частиц с импульсом p через потенциал, эквивалентно интегральному уравнению

$$\Psi_\rho^+(x) = e^{ipx/\hbar} - \int G_E^+(x, x') U(x') \Psi_\rho^+(x') dx' \quad (3)$$

(сравнить со случаем состояний д.с., рассмотренным в 2.20). Первое слагаемое в правой части (3) описывает падающие частицы, а интегральный член на больших расстояниях $x \rightarrow \pm\infty$ описывает как отраженные частицы, так и изменение в.ф. прошедших частиц под действием потенциала (чтобы убедиться в этом, следует рассмотреть асимптотику второго слагаемого при $x \rightarrow \pm\infty$ и учесть, что $k = |p|/\hbar$).

Для потенциала $U = \alpha\delta(x)$ уравнение (3) принимает вид

$$\Psi_\rho^+(x) = e^{ipx/\hbar} - \frac{i\alpha}{\hbar^2 k} e^{ik|x|} \Psi_\rho^+(0). \quad (4)$$

Отсюда находим $\Psi_\rho^+(0)$ (а тем самым и $\Psi_\rho^+(x)$):

$$\Psi_\rho^+(0) = (1 + i\alpha/\hbar^2 k)^{-1}, \quad (5)$$

следующие из (4), (5) значения D и R совпадают, естественно, с полученными ранее в задаче 2.30.

2.43. Рассмотрим интеграл $I(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_\rho^{+*}(x') \Psi_\rho^+(x) d\rho$,

считая в.ф. $\Psi_\rho^+(x)$ нормированными на $\delta(\rho - \rho')$. Они лишь множителем $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ отличаются от в.ф. (4), найденных

в предыдущей задаче. Учитывая это, запишем интеграл в виде:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{i p (x - x')}{\hbar} \right] dp - \\ & - \frac{i\tilde{\alpha}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left\{ \frac{\exp(-i(kx' - |kx|))}{|k| + i\tilde{\alpha}} - \right. \\ & - \frac{\exp[i(kx - |kx'|)]}{|k| - i\tilde{\alpha}} + \frac{\exp[-i(|kx'| - |kx|)]}{2(|k| - i\tilde{\alpha})} - \\ & \left. - \frac{\exp[-i(|kx'| - |kx|)]}{2(|k| + i\tilde{\alpha})} \right\}, \quad (1) \end{aligned}$$

где $\tilde{\alpha} = m\alpha/\hbar^2$. Первый интеграл в (1) равен $\delta(x - x')$, во втором же сделаем следующие преобразования. Замечая, что он является четной функцией x и x' , заменим их на $|x|$ и $|x'|$; разобьем область интегрирования на две: $(-\infty, 0)$ и $(0, \infty)$, и после простых алгебраических преобразований приводим его к виду

$$- \frac{i\tilde{\alpha}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp[ik(|x| + |x'|)]}{k + i\tilde{\alpha}} dk. \quad (2)$$

Так как $\tilde{\alpha} > 0$ (δ -барьер), то, замыкая контур интегрирования в (2) в верхнюю полуплоскость, находим, что этот интеграл равен нулю. Таким образом, $I(x, x') = \delta(x - x')$, что и выражает условие *полноты* системы функций $\Psi_p^+(x)$.

2.44. Сделав в формулах предыдущей задачи замену α на $-\alpha$, имеем ($\tilde{\alpha} = m\alpha/\hbar^2 > 0$):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p^{(+)*}(x') \Psi_p^+(x) dp = \delta(x - x') + \\ + \frac{i\tilde{\alpha}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik(|x| + |x'|))}{k - i\tilde{\alpha}} dk. \quad (1) \end{aligned}$$

Учитывая значение интеграла в правой части⁸⁾ и вид нормированной в.ф. $\Psi_0(x)$ единственного состояния д.с. в δ -яме (см. 2.7), замечаем, что второе слагаемое справа в (1) равно

$$-i\tilde{\alpha} \exp(-i\tilde{\alpha}(|x| + |x'|)) = -\Psi_0^*(x') \Psi_0(x).$$

⁸⁾ Интеграл вычисляется с помощью вычетов замыканием контура интегрирования в верхнюю полуплоскость.

Таким образом приходим к соотношению

$$\Psi_0^*(x') \Psi_0(x) + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p^{(+)*}(x') \Psi_p^+(x) dp = \delta(x - x'),$$

выражающему *полноту* системы с.ф. гамильтониана в случае δ -ямы.

2.45. Искомые функции Грина удовлетворяют уравнению

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \alpha \delta(x) - E \right] G_E(x, x') = \delta(x - x') \quad (1)$$

и соответствующим граничным условиям. Используя общий метод их построения (см., например, [15, с. 136]) и учитывая, что в поле отталкивания отсутствуют состояния д.с., имеем

$$G_E^{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p^{(+)*}(x') \Psi_p^+(x) \frac{2m dp}{p^2 - 2m(E \pm i\gamma)} \quad (2)$$

($\gamma > 0$ бесконечно мало). Здесь $\Psi_p^+(x)$ — нормированные на $\delta(p - p')$ в.ф., описывающие процесс отражения. Подставляя их явное выражение (они без множителя $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ приведены в 2.42), получаем

$$\begin{aligned} G_E^{\pm}(x, x') = & \frac{m}{\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik(x - x'))}{k^2 - (k_0^2 \pm i\gamma)} dk - \\ & - \frac{im\bar{\alpha}}{\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{k^2 - (k_0^2 \pm i\gamma)} \left\{ \frac{\exp(-i(kx' - |kx|))}{|k| + i\bar{\alpha}} - \right. \\ & - \frac{\exp(i(kx - |kx'|))}{|k| - i\bar{\alpha}} + \frac{\exp(-i(|kx'| - |kx|))}{2(|k| - i\bar{\alpha})} - \\ & \left. - \frac{\exp(-i(|kx'| - |kx|))}{2(|k| + i\bar{\alpha})} \right\}, \quad (3) \end{aligned}$$

где $\bar{\alpha} = m\alpha/\hbar^2$, $k_0^2 = 2mE/\hbar^2$. Первый интеграл здесь представляет функцию Грина свободной частицы (см. Д1.3 и 2.42)

$$G_{E, \text{св}}^{\pm} = \pm i \sqrt{m/2\hbar^2 E} \exp\left(\pm i \sqrt{2mE/\hbar^2} |x - x'|\right) \quad (4)$$

(отметим, что $\pm \sqrt{E} = \sqrt{E \pm i\gamma}$ и для перехода от значений $E > 0$, для которых и приведено это выражение, к $E < 0$ следует просто заменить $\pm i \sqrt{E}$ на $-\sqrt{(-E)}$).

Второй интеграл в (3) (фактически сумму четырех интегралов) можно упростить, если заметить, что он является четной

функцией x и x' , заменить их на $|x|$, $|x'|$ и затем разбить область интегрирования на две: $(-\infty, 0)$ и $(0, \infty)$. При этом происходит взаимное сокращение большинства слагаемых, так что весь второй интеграл в (3) приводится к виду

$$-\frac{i m \bar{\alpha}}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik(|x| + |x'|)) dk}{(k^2 - (k_0^2 \pm i\gamma))(k + i\bar{\alpha})}. \quad (5)$$

Его легко вычислить с помощью вычетов замыканием контура интегрирования в верхнюю полуплоскость. При этом внутри контура имеется лишь один полюс в точке $k = \pm k_0 + i\gamma$ (при $E < 0$ полюс в точке $k = i|k_0|$) и выражение (5) оказывается равным

$$\pm \frac{m \bar{\alpha}}{\hbar^2 k_0} \frac{\exp(\pm i k_0 (|x| + |x'|))}{\pm k_0 + i\bar{\alpha}}.$$

Окончательное выражение для функций Грина имеет вид

$$G_E^\pm = \pm \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2 E}} \left\{ i \exp\left(\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} |x - x'| \right) + \frac{m \alpha \exp(\pm i \sqrt{2mE/\hbar^2} (|x| + |x'|))}{(\pm \sqrt{2m\hbar^2 E} + i m \alpha)} \right\}. \quad (6)$$

Точно так же, как и в случае свободной частицы, найденные функции Грина можно рассматривать как граничные значения единой функции \tilde{G}_E , рассматриваемой как функция комплексной переменной E и получаемой из (6) опусканием знаковых индексов (\pm) (сравнить с 2.42). Отличие аналитических свойств \tilde{G}_E в данной задаче от случая свободной частицы состоит в наличии у нее полюса в точке $\sqrt{E_0} = -i\alpha \sqrt{m/2\hbar^2}$, т. е. $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$, причем так как $\alpha > 0$, этот полюс находится на нефизическом листе и отвечает виртуальному уровню (сравнить с результатом следующей задачи).

2.46. Из уравнения для функции Грина частицы в δ -потенциале и граничных условий следует, что полученное в предыдущей задаче выражение (6) справедливо при любом знаке α , т. е. как для барьера, так и ямы. При этом в случае потенциала притяжения полюс \tilde{G}_E находится уже на физическом листе и E_0 совпадает со значением энергии уровня, существующего в δ -яме.

Отметим, что если иметь в виду формулу (2) предыдущей задачи, то переход от барьера к яме состоит не только в замене α на $-\alpha$, но и в добавлении к правой части слагаемого $\Psi_0^*(x') \Psi_0(x)/(E - E_0)$, отвечающего связанному состоянию. Однако теперь при вычислении интеграла (5) с $\alpha < 0$ внутри контура появляется еще один полюс: в точке $k_1 = i|\bar{\alpha}|$. Вклад

от этого полюса компенсирует указанное дополнительное слабое, что и обеспечивает справедливость формулы (6) при любом знаке α .

2.47. Уравнение для функции Грина в импульсном представлении

$$\left(\frac{p^2}{2m} - (E \pm i\gamma)\right) G_E^\pm(p, p') + \frac{\alpha}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} G_E^\pm(p'', p') dp'' = \delta(p - p'). \quad (1)$$

Здесь учтен вид оператора \hat{U} (см. задачу 2.17) и введены добавки $\pm i\gamma$ к энергии, обеспечивающие выполнение требуемых граничных условий (сравнить с 2.45). Обозначив

$$C_E^\pm(p') = (\alpha/2\pi\hbar) \int G_E^\pm(p'', p') dp'', \quad (2)$$

получаем из (1)

$$G_E^\pm = [\delta(p - p') - C_E^\pm(p')] (p^2/2m - (E \pm i\gamma))^{-1}. \quad (3)$$

Проинтегрировав это выражение по p в бесконечных пределах и учтя (2), находим явный вид функции $C_E^\pm(p')$, а с нею и функцию Грина частицы:

$$G_E^\pm(p, p') = \frac{\delta(p - p')}{p^2/2m - E \mp i\gamma} - \frac{\alpha \sqrt{2m\hbar^2 E}}{2\pi\hbar (\sqrt{2m\hbar^2 E} \pm i\alpha) (p^2/2m - E \mp i\gamma) (p'^2/2m - E \mp i\gamma)}. \quad (4)$$

Отметим, что $G_E^\pm(p, p')$ можно было бы найти и по функции $G_E^\pm(x, x')$ из 2.45 переходом к импульсному представлению согласно 1.41.

2.48. Так как операторы

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{kx^2}{2}, \quad \hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{ky^2}{2}$$

коммутируют друг с другом и с гамильтонианом плоского осциллятора, равным $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, то с. ф. \hat{H} могут быть выбраны также собственными функциями \hat{H}_1 и \hat{H}_2 . Учитывая это обстоятельство и известное решение у. Ш. для линейного осциллятора, см. (II. 2), находим уровни энергии и с. ф. плоского осциллятора в виде (см. также 10.25):

$$\Psi_{n_1 n_2}(x, y) = \Psi_{n_1}^{\text{осц}}(x) \Psi_{n_2}^{\text{осц}}(y); \quad E_N = \hbar\omega(N + 1), \quad N = 0, 1, \dots$$

где

$$\omega = \sqrt{k/m}, \quad N = n_1 + n_2; \quad n_1 = 0, 1, 2, \dots, \quad n_2 = 0, 1, 2, \dots$$

Так как уровню E_N с данным значением N отвечают $(N + 1)$ независимые с.ф. Ψ_{n_1, n_2} с $n_1 = 0, 1, \dots, N$ (при этом $n_2 = N - n_1$), то он является $(N + 1)$ -кратно вырожденным.

2.49. Запишем потенциал в виде $U = k_1(x + y)^2/4 + k_2(x - y)^2/4$, где $k_{1,2} = k \pm \alpha > 0$. Если теперь перейти к новым переменным $x_1 = (x + y)/\sqrt{2}$ и $y_1 = (-x + y)/\sqrt{2}$ (поворот на $\pi/4$ в плоскости (xy)), то гамильтониан примет вид суммы гамильтонианов двух независимых осцилляторов:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{k_1}{2} x_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{k_2}{2} y_1^2.$$

Соответственно энергетический спектр системы имеет вид

$$E_{n_1, n_2} = \hbar \sqrt{(k + \alpha)/m} (n_1 + 1/2) + \hbar \sqrt{(k - \alpha)/m} (n_2 + 1/2);$$

$$n_{1,2} = 0, 1, \dots$$

а с.ф., отвечающие этим уровням, очевидным образом выражаются через с.ф. линейного осциллятора (сравнить с предыдущей задачей). Читателю предлагается обсудить свойства нижней части спектра в случае $|\alpha| \ll k$ (см. по этому поводу 8.4 и 8.5).

2.50. Положив $y_1 = x_1/\gamma$, $y_2 = x_2$, где $\gamma = \sqrt{m/M}$, получим

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{k}{2} (\gamma^2 y_1^2 + y_2^2) + \alpha \gamma y_1 y_2.$$

Путем поворота координатных осей в плоскости $(y_1 y_2)$ потенциал в этом гамильтониане может быть приведен к диагональному виду $U = k_1 \tilde{y}_1^2/2 + k_2 \tilde{y}_2^2/2$. Для определения $k_{1,2}$ заметим, что если записать потенциал как $U = k_{ik} y_i y_k/2$, то при повороте системы координат величины k_{ik} преобразуются как компоненты тензора. В исходной системе координат $k_{11} = \gamma^2 k$, $k_{22} = k$, $k_{12} = k_{21} = \alpha \gamma$, а в повернутой $k'_{11} = k_1$, $k'_{22} = k_2$, $k'_{12} = k'_{21} = 0$. Учитывая инвариантность при вращении следа тензора и детерминанта матрицы, составленной из его компонент, имеем

$$k_{ii} = k_1 + k_2 = k(1 + \gamma^2), \quad \det \|k_{ik}\| = k_1 k_2 = (k^2 - \alpha^2) \gamma^2.$$

Отсюда

$$k_{1,2} = [(1 + \gamma^2)k \pm \sqrt{(1 - \gamma^2)^2 k^2 + 4\alpha^2 \gamma^2}]/2.$$

В новых переменных $\tilde{y}_{1,2}$ гамильтониан принимает вид суммы гамильтонианов двух независимых осцилляторов, что позволяет

сразу определить его спектр:

$$E_{n_1 n_2} = \hbar \sqrt{k_1/m} (n_1 + 1/2) + \hbar \sqrt{k_2/m} (n_2 + 1/2);$$

$$n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots$$

Читателю предлагается рассмотреть свойства спектра в случае $M \gg m$ (см. по этому поводу 8.59).

2.51. У. Ш. при $x_1 \leq x_2$ (считаем, что 1-я частица — слева от 2-й, так что $\Psi(x_1, x_2) = 0$ при $x_1 \geq x_2$) имеет вид

$$(\hat{H}(1) + \hat{H}(2)) \Psi = E \Psi, \quad \text{где} \quad \hat{H} = \beta^2/2m + U(x) -$$

одночастичный гамильтониан. Рассмотрим теперь функцию $\tilde{\Psi}(x_1, x_2)$, равную $\Psi(x_1, x_2)$ при $x_1 \leq x_2$ и $-\Psi(x_2, x_1)$ при $x_1 > x_2$ ($\tilde{\Psi}$ представляет антисимметричное продолжение Ψ на область $x_1 > x_2$). Так как она непрерывна в точках $x_1 = x_2$ и имеет при этом непрерывные производные⁹⁾, то $\tilde{\Psi}$ удовлетворяет указанному у. Ш. уже при всех значениях x_1, x_2 (для симметричного продолжения производная в точках $x_1 = x_2$ имеет скачок и такое утверждение не справедливо). Его общее решение очевидно:

$$\tilde{\Psi}_{n_1 n_2} = \Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2), \quad E_{n_1 n_2} = E_{n_1} + E_{n_2},$$

где $E_n, \Psi_n(x)$ — спектр и с. ф. одночастичного гамильтониана. При этом антисимметричный характер рассматриваемых в. ф. $\tilde{\Psi}$ требует выбора их в виде

$$\tilde{\Psi}_{n_1 n_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2) - \Psi_{n_2}(x_1) \Psi_{n_1}(x_2)]$$

и накладывает ограничения на $n_{1,2}$: $n_1 \neq n_2$. Таким образом,

$$\Psi_{n_1 n_2} = [\Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2) - \Psi_{n_2}(x_1) \Psi_{n_1}(x_2)], \quad E_{n_1 n_2} = E_{n_1} + E_{n_2},$$

$$n_1 < n_2$$

($x_1 \leq x_2$). При этом энергетический уровень является двукратно вырожденным: второе независимое решение у. Ш. соответствует ситуации, когда 1-я частица находится справа от 2-й.

2.52. Энергетический спектр системы описывается выражением

$$E_{n_1 \dots n_N} = \sum_{a=1}^N E_{n_a}, \quad \text{причем} \quad n_1 < n_2 < \dots < n_N.$$

Вид с. ф. читателю предлагается обсудить самостоятельно.

⁹⁾ Непрерывность производных $\tilde{\Psi}$ по $x_{1,2}$ в точках $x_1 = x_2$ следует из дифференцирования соотношения $\tilde{\Psi}(x, x) = 0$.

2.53. Общее решение у. Ш. при $n < x/a < (n+1)$ имеет вид

$$\Psi = A_n \exp(ik(x - na)) + B_n \exp(-ik(x - na)), \quad (1)$$

где $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Рассматривая независимые решения, удовлетворяющие условию $\Psi(x+a) = \mu\Psi(x)$, получаем

$$A_{n-1} = A_n/\mu, \quad B_{n-1} = B_n/\mu. \quad (2)$$

В то же время сшиванье решения в точке $x = na$ (согласно 2.6) приводит к соотношениям

$$A_n + B_n = \exp(ika) A_{n-1} + \exp(-ika) B_{n-1}, \quad (3)$$

$$(1 + 2i\alpha/\hbar^2 k) A_n - (1 - 2i\alpha/\hbar^2 k) B_n = \\ = \exp(ika) A_{n-1} - \exp(-ika) B_{n-1}.$$

Исключив отсюда A_{n-1} , B_{n-1} с помощью (2), получаем систему двух линейных относительно A_n , B_n уравнений. Условие существования нетривиального решения системы дает

$$\mu^2 - 2\mu f(E) + 1 = 0, \quad f(E) \equiv \cos ka + (m\alpha/\hbar^2 k) \sin ka, \quad (4)$$

$$B_n = (\mu - \exp(ika)) (\exp(-ika) - \mu)^{-1} A_n. \quad (5)$$

Отсюда

$$\mu_{1,2} = f(E) \pm \sqrt{f^2(E) - 1}. \quad (6)$$

При любом фиксированном E (6) определяет два значения μ , соответствующие двум независимым решениям у. Ш., при этом $\mu_1 \cdot \mu_2 = 1$. При $f^2(E) > 1$ оба значения μ вещественны. При этом оба решения у. Ш. возрастают на больших расстояниях (отвечающее $\mu_1 > 1$ — при $x \rightarrow +\infty$, а $\mu_2 < 1$ — при $x \rightarrow -\infty$), так что они не соответствуют физически реализуемым состояниям частицы. Последним отвечают значения E , для которых $|\mu| = 1$, т. е. $f^2(E) \leq 1$, или

$$-1 \leq \cos ka + (m\alpha/\hbar^2 k) \sin ka \leq 1. \quad (7)$$

Таким образом допустимые значения E образуют *зоны*. Если положить ¹⁰⁾ $\mu \equiv e^{iqa}$, где $-\pi \leq qa \leq \pi$, $\hbar q$ — так называемый *квазиимпульс* (не путать с $\hbar k!$), то согласно (4) уравнение для определения зависимости $E_n(q)$ принимает вид ($n+1$ — номер зоны, см. рис. 31 для $\alpha > 0$)

$$\cos qa = \cos \sqrt{2ma^2 E_n/\hbar^2} + m\alpha (2m\hbar^2 E_n)^{-1/2} \sin \sqrt{2ma^2 E_n/\hbar^2}. \quad (8)$$

¹⁰⁾ Решения у. Ш., отвечающие определенному квазиимпульсу, называют *функциями Блоха*.

Отметим свойства спектра ¹¹⁾, следующие из (8).

1) Зависимость $E_n(q)$ от q является четной, так что состояния, различающиеся знаком квазиимпульса, являются двумя независимыми состояниями, соответствующими двукратно вырожденному уровню $E_n(q)$.

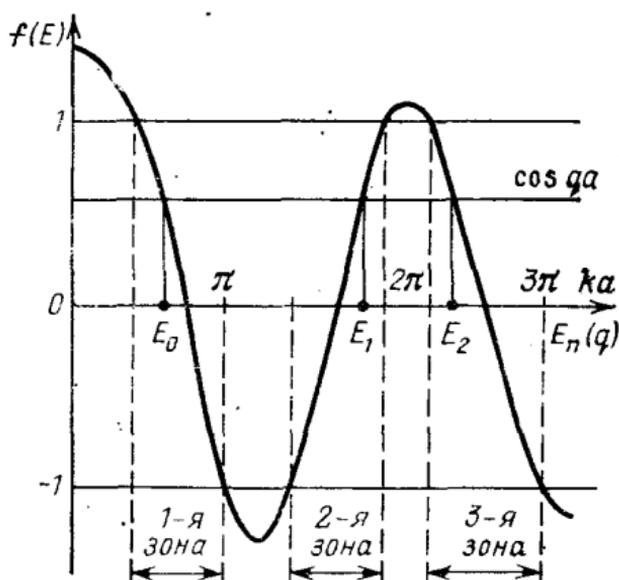


Рис. 31

2) Зоны не перекрываются. При $\alpha > 0$ все они расположены в области $E_n > 0$, причем $n\pi < k_n a \leq (n+1)\pi$, $n = 0, 1, \dots$. При $m\alpha a / [(n+1)\hbar^2] \gg 1$ зоны узки, с увеличением n их ширина увеличивается и при $m\alpha a / (n+1)\hbar^2 \ll 1$ они почти полностью занимают указанный выше интервал. При изменении знака α нижняя зона опускается в область $E < 0$ (при этом k — мнимая величина).

3) При значениях энергии, близких к границам зоны (при $q_1 = 0$ и $q_2 = \pm\pi/a$), зависимость $E_n(q)$ является параболической, т. е. $E_n(q) - E_n(q_{1,2}) \propto (q - q_{1,2})^2$ (сравнить с 8.32).

В заключение отметим, что с.ф. гамильтониана в данной задаче не нормируемы на 1, так что локализованные стационарные состояния частицы в периодическом потенциале отсутствуют; в.ф. (1), (2) соответствует частице, «свободно» (т. е. без отражений) движущейся по кристаллу с квазиимпульсом $\hbar q$.

2.54. Разрешенные зоны энергий, найденные в предыдущей задаче, являются разрешенными и в условиях данной задачи. Действительно, произвольное решение у.Ш. для значений энергии $E_n(q)$ из разрешенных зон как при $x > 0$, так и при $x < 0$

¹¹⁾ См. задачу 8.32, в которой более подробно обсуждается случай слабого поля, $m\alpha a / \hbar^2 \ll 1$.

«сводится к некоторой суперпозиции двух независимых решений в строго периодическом потенциале, отвечающих определенным квазиимпульсам $\pm \hbar q$ и не возрастающих при $x \rightarrow \pm \infty$. Отличие от случая строго периодического потенциала состоит лишь в том, что теперь независимые решения у.Ш. уже не отвечают определенному значению квазиимпульса (наглядно: происходит рассеяние — изменение квазиимпульса — частицы на дефекте решетки). При этом двукратное вырождение уровней сохраняется.

Кроме этого, появляются новые разрешенные значения энергии, соответствующие локализованным вблизи дефекта состояниям частицы. Для их определения рассмотрим решения у.Ш., отвечающие определенной четности (относительно отражения $x \rightarrow -x$).

Для четных решений при $|x| < a$ имеем $\Psi_E^+ = C \cos kx$. В то же время при $x > 0$ решение у.Ш. должно совпадать с решением у.Ш. в периодическом потенциале, удовлетворяющим условию $\Psi(x+a) = \mu \Psi(x)$ с $\mu < 1$ (другому независимому решению отвечает $\mu' = \mu^{-1} > 1$, такое решение возрастает при $x \rightarrow +\infty$). Это решение при $n < x/a < (n+1)$ имеет вид ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$)

$$\Psi^+ = \mu^n [A \cos k(x - na) + B \sin k(x - na)]. \quad (1)$$

Из условия его совпадения с $\Psi_E^+(x)$ при $0 \leq x < a$ находим $A = C$, $B = 0$, а сшивание решения (1) в точке $x = a$ (согласно 2.6) приводит к соотношениям

$$\cos ka = \mu, \quad ka \sin ka = (2ma/\hbar^2) \cos ka, \quad (2)$$

второе из которых определяет искомые четные уровни. Отметим свойства спектра этих уровней.

1) Уровни — дискретные, число их бесконечно.

2) Уровни расположены по одному между соседними зонами непрерывного спектра, и в случае $\alpha > 0$ самый нижний из них лежит ниже основной зоны.

3) По мере увеличения энергии уровня, как видно из (2), имеем $\mu \rightarrow 1$. При этом область локализации частицы вблизи дефекта неограниченно увеличивается; для нормированной на единицу в. ф. уровня

$$C^2 = (1 - \mu^2) [a (1 + (\sin 2ka)/2ka)]^{-1}.$$

В связи с этим отметим, что в случае $ma/\hbar^2 \gg 1$ в. ф. нижних таких уровней E_s ($s = 0, 1, \dots$) с $s \ll ma/\hbar^2$ локализованы в области $|x| \leq a$ (при этом $\mu \ll 1$) и близки к в. ф. стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины $2a$.

Что же касается «новых» нечетных уровней, то в условиях данной задачи они отсутствуют (здесь проявляется специфика «одноцентрового» потенциала в виде δ -функции).

2.55. Независимые решения у.Ш. при $x < 0$, где частица свободная, известны. В области же $x > 0$ два независимых решения у.Ш. для любого значения E обладают свойством $\Psi_{1,2}(x+a) = \mu_{1,2}\Psi_{1,2}(x)$, причем $\mu_1 \cdot \mu_2 = 1$. При этом для значений энергии $E_n(q)$ из разрешенных зон в бесконечном кристалле (см. 2.53) оба эти решения не возрастают при $x \rightarrow +\infty$, а для остальных значений E невозрастающим является только одно: с $\mu_1 < 1$ (оно убывает при $x \rightarrow +\infty$). Имея в виду эти замечания, легко сделать суждения о характере спектра частицы.

1) При $E > U_0$ спектр непрерывен. При этом значения энергии, принадлежащие разрешенным зонам бесконечного кристалла, двукратно вырождены (в соответствующих состояниях частица «свободно» движется по всему пространству, с некоторой вероятностью отражаясь от границы кристалла). Остальные значения невырожденные, при этом в.ф. убывает в глубь кристалла (частицы с такой энергией полностью отражаются от кристалла).

2) При $E < U_0$ спектр имеет такую же зонную структуру, как и в случае бесконечного кристалла. При этом уровни уже невырожденные; в.ф. убывает с увеличением расстояния от кристалла, а при $x > 0$ представляет определенную суперпозицию состояний со значениями квазимпульса $\pm \hbar q$ (частица с такой энергией движется внутри кристалла, отражаясь от его границы).

3) Кроме этого, при $E < U_0$ могут существовать изолированные уровни, которым отвечают состояния частицы, локализованные вблизи границы кристалла. Для их нахождения рассмотрим решение у.Ш., убывающее при $x \rightarrow \pm\infty$. При $x < 0$ оно имеет вид $\Psi = Ce^{\kappa x}$, где $\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$, а при $x > 0$ для значений $n < x/a < (n+1)$ его можно записать в виде

$$\Psi = A\mu^n \sin [k(x - na) + \delta], \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad |\mu| < 1. \quad (1)$$

Сшивание решения в точках $x = 0$ и $x = a$ приводит к соотношениям

$$A \sin \delta = 1, \quad kA \cos \delta = \kappa; \quad \sin(ka + \delta) = \mu \sin \delta, \\ \mu k \cos \delta - k \cos(ka + \delta) = (2ma/\hbar^2) \mu \sin \delta$$

(для удобства положено $C = 1$). Отсюда

$$ka \cos ka = (\sin ka) [U_0 a/\alpha - \sqrt{2m(U_0 - E) a^2/\hbar^2}], \quad (2) \\ \mu = (U_0 a/\alpha ka) \sin ka.$$

Уравнение (2) определяет спектр рассматриваемых состояний; число уровней зависит от параметров потенциала (их может не быть вообще). Они расположены между зонами разрешенных энергий для бесконечного кристалла. При изменении параметров потенциала положение таких уровней также изменяется. При этом может происходить как появление новых связанных состояний, так и исчезновение уже существующих за счет ухода уровня в ближайшую зону (состояние делокализуется).

Предоставляя читателю дальнейший анализ спектра, следующего из (2), ограничимся для иллюстрации рассмотрением одного частного случая, когда $U_0 \gg \hbar^2/ma^2$ и $\alpha < 0$ (кристалл из δ -ям), причем $ma|\alpha|/\hbar^2 \sim 1$. При этом в области энергий $E \ll U_0$ из (2) следует, что $ka = n\pi + \varepsilon$, где $n = 1, 2, \dots$, а $|\varepsilon| \ll 1$, причем $\varepsilon \approx n\pi\alpha/U_0a$. Для таких уровней (существующих между каждыми соседними зонами)

$$\mu = \cos ka + \sqrt{(U_0 - E)/E} \sin ka \approx (-1)^n (1 + \alpha \sqrt{2m/\hbar^2 U_0}),$$

так что $|\mu| < 1$ (при этом $|\mu| \approx 1$, т. е. область локализации состояния простирается далеко в глубь кристалла). В случае $\alpha > 0$ в этой области энергий связанных состояний нет ($|\mu| > 1$ для решений уравнения (2)). Хотя такие состояния и появляются по мере увеличения U_0 (в момент появления их энергия $E = U_0$), в дальнейшем уровень «сливается» с зоной.

Глава 3

МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

3.1. Функция Гамильтона ротатора $H = M_z^2/2I$ (здесь $M_z \equiv p_\varphi$ — проекция момента ротатора на ось z , перпендикулярную плоскости вращения); соответственно оператор Гамильтона имеет вид $\hat{H} = \hat{M}_z^2/2I \equiv \hbar^2 \hat{l}_z^2/2I$. Так как \hat{H} коммутирует с \hat{l}_z , то с. ф. \hat{H} могут быть выбраны одновременно и собственными функциями \hat{l}_z , что позволяет сразу указать спектр и с. ф. гамильтониана

$$E_{|m|} = \hbar^2 m^2/2I, \quad \Psi_m = e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1)$$

Все уровни, кроме основного, двукратно вырождены. Укажем также на возможность выбора с. ф. \hat{H} в виде $\Psi_{|m|}^+ = \pi^{-1/2} \cos m\varphi$, $\Psi_{|m|}^- = \pi^{-1/2} \sin m\varphi$, при котором они имеют определенную четность (+1 или -1) при отражении координат относительно оси x .

Так как $\cos \varphi = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2$, то

$$\Psi = C \cos^2 \varphi = C (e^{2i\varphi} + 2 + e^{-2i\varphi})/4 \equiv \sum_m c_m e^{im\varphi} / \sqrt{2\pi}.$$

Отсюда непосредственно следуют распределения вероятностей различных значений проекции момента $\omega(m) = |c_m|^2$ и энергии $\omega(E|m) = \omega(m) + \omega(-m)$ (при $m \neq 0$) ротатора (а также и значение $C^2 = 4/3\pi$ из условия нормировки в. ф. на 1):

$$\omega(E_0) = \omega(0) = 2/3, \quad \omega(E_2) = 2\omega(2) = 2\omega(-2) = 1/3,$$

вероятности остальных значений равны нулю. Наконец:

$$\bar{m} = 0, \quad \overline{(\Delta m)^2} = 4/3, \quad \bar{E} = 2\hbar^2/3I, \quad \overline{(\Delta E)^2} = 8\hbar^4/9I^2.$$

3.2. Функция Гамильтона ротатора $H = \mathbf{M}^2/2I$; соответственно оператор Гамильтона имеет вид $\hat{H} = \hbar^2 \hat{I}^2/2I$, а его с. з. н. с. ф.

$$E_l = \hbar^2 l(l+1)/2I, \quad \Psi_{lm} = Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (1)$$

где $l = 0, 1, \dots$; $m = l, l-1, \dots, -l$; Y_{lm} — шаровые функции; θ, φ — полярный и азимутальный углы оси ротатора. Уровни энергии $(2l+1)$ -кратно вырождены, и имеют определенную четность, равную $(-1)^l$.

Приведенная в условии задачи в. ф. описывает состояние ротатора с определенным значением $l_z = 0$. Записав ее в виде

$$\Psi = C \cos^2 \theta = \frac{\sqrt{4\pi} C}{3} \left[\frac{1}{\sqrt{4\pi}} - \frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{\sqrt{4\pi}} \right] \equiv \sum_l c_l Y_{l0}$$

и учтя явный вид шаровых функций Y_{00} и Y_{20} (см. (III.7)), находим, что момент ротатора может принимать лишь два значения: $l = 0$ и $l = 2$, с вероятностями $\omega(0) = 5/9$ и $\omega(2) = 4/9$. При этом $E = 4\hbar^2/3I$, $\overline{(\Delta E)^2} = 8\hbar^4/3I^2$; $|C|^2 = 5/4\pi$.

3.3. Ввиду равновероятности различных значений L_z имеем

$$\begin{aligned} \overline{L_z^2} &= (2l+1)^{-1} \sum_{m=-l}^l m^2 = 2(2l+1)^{-1} \left[\frac{d^2}{d\alpha^2} \sum_{m=0}^l e^{\alpha m} \right]_{\alpha=0} = \\ &= 2(2l+1)^{-1} \left[\frac{d^2}{d\alpha^2} \frac{1 - e^{\alpha(l+1)}}{1 - e^{\alpha}} \right]_{\alpha=0} = \frac{l(l+1)}{3}. \end{aligned}$$

Отсюда в силу равноправности осей x, y, z следует

$$\mathbf{L}^2 \equiv \overline{\mathbf{L}^2} = \overline{L_x^2} + \overline{L_y^2} + \overline{L_z^2} = 3\overline{L_z^2} = l(l+1).$$

3.4. Как известно ([1], §§ 15, 26), операторы импульса $\hat{\mathbf{P}}$ и момента \mathbf{L} системы связаны с операторами преобразований

в. ф. при бесконечно малых переносах и поворотах системы координат:

$$\hat{T}(\delta a) \approx 1 + i\hbar^{-1} \delta a \hat{P} \quad \text{и} \quad \hat{R}(\delta \varphi_0) \approx 1 + i\delta \varphi_0 \hat{L}.$$

Любой перенос системы координат *перестановочен* с любым другим переносом, поэтому коммутируют и операторы компонент импульса. Совершенно аналогично обстоит дело и с переносами и поворотами вдоль одной и той же оси. Наоборот, два вращения, как и перенос и вращение, относительно двух непараллельных осей не перестановочны друг с другом, что и отвечает некоммутативности соответствующих операторов.

3.5. При вычислении коммутаторов удобно воспользоваться результатом задачи 1.4 и формулой (III.2). Приведем ответ.

а) Все коммутаторы равны нулю, что является проявлением общего свойства равенства нулю коммутатора вида $[\hat{l}_i, \hat{f}] = 0$, где \hat{f} — оператор скалярной величины.

б) Коммутаторы имеют структуру вида $[\hat{l}_i, \hat{f}_k] = i\varepsilon_{ikl} \hat{f}_l$, где \hat{f}_k — оператор k -й проекции соответствующего векторного оператора.

в) $[\hat{l}_i, \hat{f}_{kl}] = i(\varepsilon_{ikp} \delta_{nl} + \varepsilon_{iln} \delta_{kp}) \hat{f}_{pn}$, где \hat{f}_{ik} — операторы компонент соответствующего тензора 2-го ранга.

Установленная универсальная структура коммутаторов оператора компонент момента \hat{l}_i со скалярными, векторными и тензорными операторами является отражением свойства оператора \hat{A} как оператора, описывающего преобразование в. ф. при вращениях системы координат и того обстоятельства, что при этом все тензоры одного и того же ранга преобразуются одинаковым образом (независимо от конкретного вида тензора).

3.6. Искомые функции $\Psi_{r_0 l m} = C(r_0) \delta(r - r_0) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ при этом из условия нормировки $\langle r'_0, l', m' | r_0, l, m \rangle = \delta(r_0 - r'_0) \delta_{ll'} \delta_{mm'}$ следует значение $C(r_0) = r_0^{-1}$.

3.7. $\Psi_{p_z m}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ip_z z/\hbar} \cdot (2\pi)^{-1/2} e^{im\varphi} f(\rho)$, где $f(\rho)$ — произвольная функция переменной ρ (расстояние от оси z) цилиндрической системы координат.

3.8. Считая в. ф. нормированной на единицу (при этом $\int \varphi^2(\mathbf{r}) dV = 1$), находим: $\bar{\mathbf{r}} = \int \mathbf{r} \varphi^2(\mathbf{r}) dV$, $\bar{\mathbf{p}} = \mathbf{p}_0$. Так как $\hat{L}_i = \varepsilon_{ikl} x_k \hat{p}_l$, то

$$\bar{L}_i = \varepsilon_{ikl} \int \varphi(\mathbf{r}) \{x_k p_{0l} + x_k \hat{p}_l\} \varphi(\mathbf{r}) dV. \quad (1)$$

Преобразовав второе слагаемое под интегралом к виду

$$\varphi(\mathbf{r}) x_k \hat{p}_l \varphi(\mathbf{r}) = -\frac{i}{2} \hbar \frac{\partial}{\partial x_l} (\varphi^2 x_k) + \frac{i}{2} \hbar \delta_{kl} \varphi^2, \quad (2)$$

замечаем, что его вклад в \bar{L}_i равен нулю: равенство нулю интеграла от первого слагаемого в (2) очевидно после преобразования его с использованием теоремы Остроградского — Гаусса, второе же слагаемое в (2) обращается в нуль после свертки δ_{kl} с ϵ_{ikl} . Таким образом, из (1) следует $\bar{L}_i = \epsilon_{ikl} \bar{x}_k \bar{p}_l$, или $\bar{\mathbf{L}} = [\bar{\mathbf{r}}\bar{\mathbf{p}}]$.

3.9. В импульсном представлении $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}$, а $\hat{\mathbf{r}} = i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}$, при этом $\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar[\mathbf{p}\nabla_{\mathbf{p}}]$, что по форме совершенно аналогично виду $\hat{\mathbf{L}}$ в \mathbf{r} -представлении, отличаясь лишь заменой \mathbf{r} на \mathbf{p} , и позволяет сразу указать вид с. ф. $\Psi_{lm}(\mathbf{p}) = Y_{lm}(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi})$, операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z , здесь $\tilde{\theta}$, $\tilde{\varphi}$ — полярный и азимутальный углы вектора \mathbf{p} в сферических координатах (в \mathbf{p} -, как и в \mathbf{r} -представлении оператор момента действует лишь на угловые переменные).

Равенство нулю среднего значения $\langle l, m | \mathbf{p} | l, m \rangle$ следует, например, из соображений, связанных с определенной четностью шаровых функций (сравнить с 1.16).

3.10. Из коммутационных соотношений для компонент момента следует, что $\hat{L}_z \hat{L}_{\pm} = \hat{L}_{\pm} (\hat{L}_z \pm 1)$. Применяв это операторное равенство к с. ф. Ψ_m , получаем $\hat{L}_z (\hat{L}_{\pm} \Psi_m) = (m \pm 1) (\hat{L}_{\pm} \Psi_m)$, т. е. функции $\hat{L}_{\pm} \Psi_m$ также являются с. ф. \hat{L}_z (в частных случаях, когда $m = \pm l$, где l — момент частицы, одна из этих функций равна нулю тождественно).

Из ортогональности с. ф. следует

$$\langle m | \hat{L}_{\pm} | m \rangle \propto \langle m | m \pm 1 \rangle = 0, \quad \langle m | \hat{L}_{\pm}^2 | m \rangle = 0. \quad (1)$$

Отсюда $\bar{L}_x \pm i\bar{L}_y = 0$, или $\bar{L}_x = \bar{L}_y = 0$. Второе из соотношений (1) эквивалентно равенствам

$$\overline{l_x^2 - l_y^2} \pm i \overline{(l_x l_y + l_y l_x)} = 0.$$

из которых следует, в частности:

$$\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2}, \quad \overline{l_x l_y + l_y l_x} = 0,$$

3.11. Так как $\overline{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2} \equiv \overline{\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2} = l(l+1) - m^2$, то с учетом результата предыдущей задачи $\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2} = [l(l+1) - m^2]/2$.

Далее, оператор проекции момента на ось \tilde{z} имеет вид

$$\hat{L}_{\tilde{z}} = \cos \alpha \cdot \hat{L}_z + \sin \alpha \cos \beta \cdot \hat{L}_x + \sin \alpha \sin \beta \cdot \hat{L}_y, \quad (1)$$

где α, β — полярный и азимутальный углы направления оси \tilde{z} . Усредняя оператор (1) по состоянию Ψ_{lm} , находим $\bar{l}_{\tilde{z}} = m \cos \alpha$ (согласно задаче 3.10 $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$). Отметим, что для справедливости этого соотношения предположение об определенном значении l не является обязательным. Наконец, учитывая при усреднении оператора $\hat{l}_{\tilde{z}}^2$ результат предыдущей задачи, находим $\overline{\hat{l}_{\tilde{z}}^2}$, а с ним и

$$\overline{(\Delta l_{\tilde{z}})^2} = \overline{l_{\tilde{z}}^2} - \bar{l}_{\tilde{z}}^2 = \frac{1}{2} [l(l+1) - m^2] \sin^2 \alpha.$$

3.12. Приведенное соотношение следует непосредственно из (III.6), если в последнем положить $\theta' = \theta$, $\varphi' = \varphi$; при этом $\cos \alpha = 1$, $P_l(1) = 1$.

3.13. В. ф. состояния с моментом l и проекцией $l_z = 0$ имеет вид $\Psi_{l, l_z=0}(\mathbf{n}) = ((2l+1)/4\pi)^{1/2} P_l(\cos \theta)$. Замечая, что $\cos \theta = \mathbf{n}\mathbf{k}$, где \mathbf{k} — орт вдоль оси z , и имея в виду равноправность всех направлений в пространстве, получаем $\Psi_{l, l_z=0} = ((2l+1)/4\pi)^{1/2} P_l(\mathbf{n}\mathbf{n}_0)$. Значения коэффициентов в разложении этой в. ф. по шаровым функциям $Y_{lm}(\mathbf{n})$ непосредственно следуют из (III.6) и вероятность значения $l_z = m$ оказывается равной $\omega(m) = (4\pi/(2l+1)) |Y_{lm}(\mathbf{n}_0)|^2$ (она зависит только от угла α между осями z и \tilde{z}).

3.14. Согласно 1.43 имеет место соотношение (при этом речь идет о l_{z^-} - и $l_{\tilde{z}^-}$ -представлениях): $\omega_l(m_1; m_2, \alpha) = \omega_{lm_2}(m_1, \alpha)$, где $\omega_{lm_2}(m_1, \alpha)$ является вероятностью значения проекции m_1 на ось z в состоянии с определенным значением проекции m_2 на ось \tilde{z} . Эта вероятность зависит только от значения $|\alpha|$ и поэтому

$$\omega_{lm_2}(m_1, \alpha) = \omega_l(m_2; m_1, \alpha).$$

Из приведенных двух соотношений и следует утверждение задачи.

3.15. Вид проекционного оператора

$$\hat{P}(M) = \prod_{m=-l}^l (M - m)^{-1} (\hat{L}_z - m),$$

где штрих означает отсутствие сомножителя с $m = M$, следует из результата 1.35.

3.16. Из соотношений $\hat{l}_l \hat{l}_k - \hat{l}_k \hat{l}_l = i \varepsilon_{ikl} \hat{l}_l$, с учетом формулы $\text{Sp}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Sp}(\hat{B}\hat{A})$, следует $\text{Sp} \hat{l}_i = 0$ (сравнить с 1.5).

3.17. Матрицы L_i представляют векторный (точнее, псевдо-векторный) оператор, а их произведение $L_i L_k \dots L_n$ — тензорный оператор. После взятия шпура такой оператор становится обычным числовым тензором, выражающимся лишь через универсальные тензоры δ_{ik} и ε_{ikl} , так как никаких других векторов и тензоров в условиях задачи не существует. Поэтому имеем:

а) $\text{Sp } L_i = 0$;

б) $\text{Sp}(L_i L_k) = A \delta_{ik}$, значение A находим, взяв свертку по индексам i и k :

$$3A = \text{Sp } \widehat{L}^2 = L(L+1) \text{Sp } \widehat{1} = L(L+1)(2L+1);$$

в) $\text{Sp}(\widehat{L}_i \widehat{L}_k \widehat{L}_l) = B \varepsilon_{ikl}$; для определения B имеем

$$2B = \text{Sp}(\widehat{L}_1 \widehat{L}_2 \widehat{L}_3) - \text{Sp}(\widehat{L}_2 \widehat{L}_1 \widehat{L}_3) = i \text{Sp}(\widehat{L}_3^2) = \frac{i}{3} \text{Sp } \widehat{L}^2 = \\ = iL(L+1)(2L+1)/3$$

(здесь использовано соотношение $\widehat{L}_1 \widehat{L}_2 - \widehat{L}_2 \widehat{L}_1 = i \widehat{L}_3$);

г) $\text{Sp}(\widehat{L}_i \widehat{L}_k \widehat{L}_l \widehat{L}_m) = C_1 \delta_{ik} \delta_{lm} + C_2 \delta_{il} \delta_{km} + C_3 \delta_{im} \delta_{kl}$. (1)

Для определения C_a выполним сначала свертки по i и k , а также по l и m , и получим

$$9C_1 + 3C_2 + 3C_3 = \text{Sp}(\widehat{L}^2 \widehat{L}^2) = (2L+1)L^2(L+1)^2. \quad (2)$$

Затем возьмем свертки по i и m , а также k и l :

$$3C_1 + 3C_2 + 9C_3 = \text{Sp}(\widehat{L}^2 \widehat{L}^2) = (2L+1)L^2(L+1)^2. \quad (3)$$

Наконец, свернем¹⁾ по индексам i и l , а также k и m :

$$3C_1 + 9C_2 + 3C_3 = (2L+1)L^2(L+1)^2 - L(L+1)(2L+1). \quad (4)$$

Из (2), (3), (4) следует

$$C_1 = C_3 = [2L^2(L+1)^2(2L+1) + L(L+1)(2L+1)]/30,$$

$$C_2 = [L^2(L+1)^2(2L+1) - 2L(L+1)(2L+1)]/15.$$

3.18. В. ф. состояния с $l=1$ и $l_z=0$ есть $Y_{10}(\mathbf{n}) \propto \cos \theta \equiv \mathbf{n}\mathbf{k}$, где \mathbf{k} — орт вдоль оси z . Ввиду равноправности всех направлений в пространстве для перехода к случаю $l_z=0$ следует просто заменить \mathbf{k} на \mathbf{n}_0 — орт вдоль оси \bar{z} , так что (сравнить с 3.13)

$$\Psi_{l=1, \bar{m}=0} = i(3/4\pi)^{1/2} (\mathbf{n}_0 \mathbf{n}) = \\ = i(3/4\pi)^{1/2} \{\cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta)\},$$

¹⁾ При этом в (1) удобно подставить $\widehat{L}_k \widehat{L}_l = \widehat{L}_l \widehat{L}_k + i \varepsilon_{kls} \widehat{L}_s$ и воспользоваться соотношением $\varepsilon_{kls} \varepsilon_{lsk} = 6$.

3.19. Имея в виду выражения для Y_{1m} и равноправность различных ориентаций системы координат, искомые в. ф. можно получить с помощью циклической перестановки переменных x, y, z . Так

$$\begin{aligned}\Psi_{l=1, l_x=\pm 1} &= \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{y \pm iz}{r} = \\ &= \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\sin \theta \sin \varphi \pm i \cos \theta).\end{aligned}$$

Аналогично устанавливается вид и других в. ф. (см. также 3.18).

3.20. Обозначив через $w(\pm 1)$ вероятности проекций момента $\tilde{m} = \pm 1$, согласно 3.11 имеем

$$\bar{l}_z = \sum_{\tilde{m}} w(\tilde{m}) \tilde{m} = w(1) - w(-1) = m \cos \alpha,$$

$$\bar{l}_z^2 = \sum_{\tilde{m}} w(\tilde{m}) \tilde{m}^2 = w(1) + w(-1) = m^2 + (1 - 3m^2/2) \sin^2 \alpha.$$

Отсюда

$$\begin{aligned}w(1, m) &\equiv w(1) = [2m^2 + 2m \cos \alpha + (2 - 3m^2) \sin^2 \alpha]/4, \\ w(-1, m) &\equiv w(-1) = [2m^2 - 2m \cos \alpha + (2 - 3m^2) \sin^2 \alpha]/4, \\ w(0, m) &= 1 - w(1) - w(-1).\end{aligned}$$

3.21. В. ф. $\Psi_{l_i=0}(\theta, \varphi)$ ($i = 1, 2, 3$) имеют вид ($a = i \sqrt{3/4\pi}$):

$$\begin{aligned}\Psi_{l_z=0} &= Y_{10} = az/r = a \cos \theta; & \Psi_{l_x=0} &= ax/r = a \sin \theta \cos \varphi; \\ \Psi_{l_y=0} &= ay/r = a \sin \theta \sin \varphi\end{aligned}$$

и их независимость и полнота очевидны (в случае $l = 1$ имеется три независимых в. ф.). Легко заметить, что различные в. ф. $\Psi_{l_i=0}$ ортогональны:

$$\int \Psi_{l_i=0}^* \Psi_{l_k=0} d\Omega = \delta_{ik}$$

и поэтому коэффициенты C_i в разложении произвольной, нормированной в. ф. $\Psi_{l=1}$ по этим функциям определяют вероятность $w(i) = |C_i|^2$ того, что проекция момента на i -ю ось равна нулю. Отметим, что этот результат не имеет непосредственного отношения к обычному разложению произвольной в. ф. в ряд по с. ф. эрмитова оператора!

3.22. По формулам (III. 9) для $l = 1$ получаем

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

$$\hat{l}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad (1)$$

$$\hat{l}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{l}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Обозначив $\Psi_{l_x=0} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$, имеем уравнение на с. ф. в виде

$$\hat{l}_x \Psi_{l_x=0} = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b/\sqrt{2} \\ (a+c)/\sqrt{2} \\ b/\sqrt{2} \end{pmatrix} = 0.$$

Отсюда: $b = 0$, $a = -c$, причем для нормировки в. ф. на единицу следует взять $|a| = 1/\sqrt{2}$.

3.23. Так как с. з. l_x и l_y при $l = 1$ равны лишь $0, \pm 1$, то $\hat{l}_x^3 = \hat{l}_x$ и $\hat{l}_y^3 = \hat{l}_y$ (сравнить с 1.17). Далее, в состоянии с $l = 1$ и $l_z = m$ имеем $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$ и $\bar{l}_x^2 = \bar{l}_y^2 = (2 - m^2)/2$ (см., например, 3.11). Отсюда следует: $\bar{l}_x^n = \bar{l}_y^n = 0$, если n — нечетное; $\bar{l}_x^n = \bar{l}_y^n = (2 - m^2)/2$ при четном n ($n > 0$).

3.24. Так как оператор $\Phi_0 \hat{l}$ в пространстве векторов состояний с $l = 1$ имеет лишь три с. з.: $0, \pm \Phi_0$, то согласно 1.22 следует

$$\hat{R} = \exp(i\Phi_0 \hat{l}) = 1 + i \sin \Phi_0 \cdot (\mathbf{n}_0 \hat{l}) - (1 - \cos \Phi_0) (\mathbf{n}_0 \hat{l})^2, \quad (1)$$

где $\mathbf{n}_0 = \Phi_0/\varphi_0$. Выберем вектор поворота Φ_0 таким, чтобы в результате вращения ось z исходной системы координат по отношению к осям повернутой системы имела бы такую же ориентацию, как и ось \tilde{z} по отношению к исходной системе. При этом в. ф. $\Psi_{\tilde{m}}(\theta, \varphi) = \hat{R} Y_{lm}(\theta, \varphi)$ будет описывать состояние частицы с моментом l и его проекцией m на ось \tilde{z} в соответствии со смыслом оператора \hat{R} как оператора вращения системы

координат. Нетрудно сообразить, что для этого следует выбрать $\varphi_0 = (\alpha \sin \beta, -\alpha \cos \beta, 0)$. При этом

$$\hat{R} = 1 + i \sin \alpha (\hat{l}_x \sin \beta - \hat{l}_y \cos \beta) - (1 - \cos \alpha) (\hat{l}_x \sin \beta - \hat{l}_y \cos \beta)^2,$$

и для в. ф. $\Psi_{\tilde{m}=0} = \hat{R} Y_{10}$, воспользовавшись выражениями для \hat{l}_i и явным видом Y_{10} , после простых вычислений получаем

$$\Psi_{\tilde{m}=0} = i \sqrt{3/4\pi} \{ \cos \alpha \cos \theta + \sin \alpha \sin \theta \cos (\varphi - \beta) \} \quad (2)$$

в согласии с результатом задачи 3.18.

3.25. Для $P(m)$ имеем выражения (сравнить с 3.15):

$$\hat{P}(0) = 1 - \hat{l}_z^2, \quad \hat{P}(\pm 1) = (\hat{l}_z^2 \pm \hat{l}_z)/2. \quad (1)$$

Проекционные операторы $P(\tilde{m})$ получаются из выражений (1) заменой \hat{l}_z на оператор $\hat{l}_{\tilde{z}}$, имеющий вид

$$\hat{l}_{\tilde{z}} = n_0 \hat{l} = \cos \alpha \hat{l}_z + \sin \alpha \cos \beta \hat{l}_x + \sin \alpha \sin \beta \hat{l}_y,$$

n_0 — орт вдоль оси \tilde{z} , α и β — полярный и азимутальный углы направления n_0 . В частности, для оператора $P(\tilde{m} = 0)$ в $\hat{l}_{\tilde{z}}$ -представлении, воспользовавшись формулами (1) из 3.22, получаем

$$\hat{P}(\tilde{m} = 0) = \begin{vmatrix} (\sin^2 \alpha)/2 & -e^{-i\beta} (\sin 2\alpha)/2 \sqrt{2} & -e^{-2i\beta} (\sin^2 \alpha)/2 \\ -e^{i\beta} (\sin 2\alpha)/2 \sqrt{2} & \cos^2 \alpha & e^{-i\beta} (\sin 2\alpha)/2 \sqrt{2} \\ -e^{2i\beta} (\sin^2 \alpha)/2 & e^{i\beta} (\sin 2\alpha)/2 \sqrt{2} & (\sin^2 \alpha)/2 \end{vmatrix}.$$

Поддействовав этим оператором на произвольную функцию

(которую удобно выбрать, например, в виде $\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$), на-

ходим с. ф. $\Psi_{\tilde{m}=0} = C \hat{P}(\tilde{m} = 0) \Psi$ оператора $\hat{l}_{\tilde{z}}$, отвечающую с. з. $l_{\tilde{z}} = 0$:

$$\Psi_{\tilde{m}=0} = \begin{pmatrix} (\sin \alpha)/\sqrt{2} \\ -e^{i\beta} \cos \alpha \\ -e^{2i\beta} (\sin \alpha)/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $C = \sqrt{2}/\sin \alpha$ выбрано для нормировки в. ф. на 1. При $\alpha = \pi/2$ и $\beta = 0$ функция (1) воспроизводит результат из 3.22 для в. ф. $\Psi_{l_x=0}$. Далее, учтя вид шаровых функций $Y_{1m}(n)$ (см. (III. 7)), замечаем, что в. ф. состояния (1) в координатном

представлении, $\Psi = \sum c_m Y_{1m}$, лишь фазовым множителем отличается от найденных ранее в 3.18 и 3.24 другими способами.

3.26. Оператор момента системы из двух частиц имеет вид

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{l}}_1 + \hat{\mathbf{l}}_2 = -i [\mathbf{r}_1 \nabla_1] - i [\mathbf{r}_2 \nabla_2]. \quad (1)$$

Перейдем от $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ к новым переменным \mathbf{r}, \mathbf{R} :

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, & \mathbf{R} &= (m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2) / (m_1 + m_2), \\ \mathbf{r}_1 &= \mathbf{R} - m_2 \mathbf{r} / (m_1 + m_2), & \mathbf{r}_2 &= \mathbf{R} + m_1 \mathbf{r} / (m_1 + m_2). \end{aligned}$$

Так как

$$\nabla_1 = (m_1 / (m_1 + m_2)) \nabla_{\mathbf{R}} - \nabla_{\mathbf{r}}, \quad \nabla_2 = (m_2 / (m_1 + m_2)) \nabla_{\mathbf{R}} + \nabla_{\mathbf{r}},$$

то оператор (1) можно записать в виде

$$\hat{\mathbf{L}} = -i [\mathbf{r} \nabla_{\mathbf{r}}] - i [\mathbf{R} \nabla_{\mathbf{R}}],$$

где первое слагаемое является оператором момента системы двух частиц в с. ц. и., а второе представляет оператор момента, связанного с движением центра масс.

3.27. Из соотношения $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{l}}_1 + \hat{\mathbf{l}}_2$ следуют выражения

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{l}}_1 \hat{\mathbf{l}}_2 &= (\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{l}}_1^2 - \hat{\mathbf{l}}_2^2) / 2, & \hat{\mathbf{l}}_1 \hat{\mathbf{L}} &= (\hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{l}}_1^2 - \hat{\mathbf{l}}_2^2) / 2, \\ & & \hat{\mathbf{l}}_2 \hat{\mathbf{L}} &= (\hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{l}}_2^2 - \hat{\mathbf{l}}_1^2) / 2 \end{aligned}$$

(здесь учтена коммутативность одноименных компонент $\hat{\mathbf{L}}$ и $\hat{\mathbf{l}}_{1,2}$). Из них непосредственно видно, что в состояниях с определенными значениями $\mathbf{L}^2, l_1^2, l_2^2$ рассматриваемые скалярные произведения также имеют определенные значения.

3.28. Коммутаторы имеют такую же структуру, как и в 3.5.

3.29. Возможные значения момента совокупной системы:

$$\max \{ |l_1 - l_2|, |m_1 + m_2| \} \leq L \leq l_1 + l_2.$$

Учитывая коммутативность \hat{l}_{1i} и \hat{l}_{2k} , соотношение $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{l}}_1^2 + \hat{\mathbf{l}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{l}}_1 \hat{\mathbf{l}}_2$ и равенство нулю средних $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$ в состоянии с определенным значением l_z (см. 3.10), легко находим искомые средние: $\bar{L}_x = \bar{L}_y = 0, \bar{L}_z = m_1 + m_2$, а также

$$\bar{\mathbf{L}}^2 = l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) + 2m_1 m_2. \quad (1)$$

При $m_1 = l_1, m_2 = l_2 - 1$ возможны лишь значения суммарного момента $L_1 = l_1 + l_2$ и $L_2 = l_1 + l_2 - 1$. Так как при этом $\omega(L_2) = 1 - \omega(L_1)$, то, с учетом (1), имеем

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{L}}^2 &= \sum_L \omega(L) L(L + 1) = L_1^2 - L_1 + 2L_1 \omega(L_1) = \\ &= l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) + 2l_1(l_2 - 1). \end{aligned}$$

Отсюда: $\omega(L_1) = l_2 / (l_1 + l_2), \omega(L_2) = l_1 / (l_1 + l_2)$.

3.30. Рассмотрим сначала в. ф. Ψ_{LM} состояния с $L = 2l$ и $M = 2l$, имеющую вид $\Psi_{2l, 2l} = \delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l}$. Она симметрична по отношению к перестановке m_1 и m_2 . Точно так же симметричными являются и в. ф. состояний с $L = 2l$ и другими значениями M . Это следует из соотношения $\Psi_{L, M=L-n} = CL_-^n \Psi_{L, L}$, где $\hat{L}_- = (\hat{l}_{1x} + \hat{l}_{2x}) - i(\hat{l}_{1y} + \hat{l}_{2y})$ и при $l_1 = l_2$ является симметричным по отношению к перестановке переменных складываемых моментов оператором (матрицей).

Далее, рассмотрим состояния с $M = 2l - 1$ и запишем самую общую в. ф. таких состояний в виде суммы симметричного и антисимметричного слагаемых

$$\Psi_{M=2l-1} = c_1 (\delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l-1} + \delta_{m_1, l-1} \delta_{m_2, l}) / \sqrt{2} + \\ + c_2 (\delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l-1} - \delta_{m_1, l-1} \delta_{m_2, l}) / \sqrt{2}.$$

Очевидно, что симметричное слагаемое здесь отвечает суммарному моменту $L_1 = 2l$, а антисимметричное — значению $L_2 = 2l - 1$ (если бы в первом слагаемом были представлены оба момента, то это противоречило бы ортогональности с. ф., отвечающих различным с. з.). Таким образом, в. ф. $\Psi_{2l-1, 2l-1}$, а с нею и любая другая в. ф., отвечающая $L = 2l - 1$ (см. выше), антисимметрична по отношению к взаимной перестановке m_1 и m_2 .

Аналогично предыдущему, можно рассмотреть состояния с $M = 2l - 2$. Теперь в. ф. $\Psi_{M=2l-2}$ включает три независимых слагаемых, из которых два (с m_1 и m_2 , равными l и $l - 2$, а также с $m_1 = m_2 = l - 1$) симметричны, а одно (с $m_1, 2$ отвечающими l и $l - 2$) антисимметрично. Антисимметричное состояние соответствует моменту $L = 2l - 1$, а два симметричных — моментам $L_1 = 2l$ и $L_2 = 2l - 2$.

Продолжая такое рассмотрение дальше, можно прийти к заключению, что состояниям с $L = 2l, 2l - 2, 2l - 4, \dots$ отвечают симметричные по отношению к перестановке m_1 и m_2 функции, а с $L = 2l - 1, 2l - 3, \dots$, — антисимметричные в. ф.

Установленный характер симметрии в. ф. имеет место как при целочисленных значениях l , так и при полуцелых, появляющихся при рассмотрении *спина* частиц (см. гл. 5).

3.31. Утверждение задачи является непосредственным следствием двух обстоятельств: 1) в силу определенной симметрии в. ф. $\Psi_{LM}(m_1, m_2)$ по отношению к перестановке m_1 и m_2 (см. 3.30) вероятности одного и того же значения m для обоих моментов одинаковы, т. е. $\omega_1(m) = \omega_2(m) \equiv \omega(m)$; 2) так как $m_1 + m_2 = M$, то имеет место соотношение $\omega_1(m_1) = \omega_2(M - m_1)$. Отсюда и следует утверждение: $\omega_{1,2}(m) = \omega_{1,2}(M - m)$.

3.32. а) При $m_1 = m_2 = \pm 1$ момент системы $L = 2$.

б) При $m_1 = \pm 1, m_2 = 0$ (а также при $m_1 = 0, m_2 = \pm 1$) момент принимает значения: $L_1 = 2$ и $L_2 = 1$. Вероятности этих значений $\omega(2) = 1/2$ и $\omega(1) = 1/2$ следуют из результата 3.29 (и из 3.30).

в) При $m_1 = m_2 = 0$ момент может принимать лишь значения 2 и 0 ($L = 1$ сразу исключается из условия симметричности в. ф. по отношению к перестановке m_1 и m_2 , см. 3.30). При этом из условия $\overline{L^2} = 6\omega(L=2) = 4$ следует $\omega(2) = 2/3, \omega(0) = 1/3$.

г) При $m_1 = -m_2 = \pm 1$ момент может принимать все три значения: 0, 1, 2. Записав для случая $m_1 = -m_2 = 1$ в. ф. в $l_{1z}l_{2z}$ -представлении в виде

$$\Psi = \delta_{l_{1z}, 1} \delta_{l_{2z}, -1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ (\delta_{l_{1z}, 1} \delta_{l_{2z}, -1} + \delta_{l_{1z}, -1} \delta_{l_{2z}, 1}) / \sqrt{2} + (\delta_{l_{1z}, 1} \delta_{l_{2z}, -1} - \delta_{l_{1z}, -1} \delta_{l_{2z}, 1}) / \sqrt{2} \right\}, \quad (1)$$

замечаем, что вероятность значения $L = 1$, которому отвечает второе, антисимметричное слагаемое в (1), равна $\omega(L=1) = 1/2$.

Далее: $\overline{L^2} = \sum L(L+1)\omega(L) = 6\omega(2) + 1 = 2$. Отсюда $\omega(2) = 1/6, \omega(0) = 1/3$.

3.33. Понимая в условиях задачи 1.43 под \hat{A} набор коммутирующих операторов \hat{l}_{1z} и \hat{l}_{2z} с с. з. m_1 и m_2 , а под \hat{B} — набор из \hat{L}^2 и $\hat{L}_z = \hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z}$, имеем равенство вероятностей $\omega_{LM}(m_1, m_2) = \omega_{m_1 m_2}(L, M)$, т. е. вероятности значений проекций m_1 и m_2 в состоянии с определенными значениями L и M (при этом $M = m_1 + m_2$) равны вероятностям значений величин L и M в состоянии с определенными проекциями m_1 и m_2 (сравнить, например, результаты задач 3.32 и 3.35).

3.34. Запишем искомую в. ф. в виде $\Psi_{L=0} = \sum_m C_m \Psi_m^{(1)} \Psi_{-m}^{(2)}$,

где $\Psi_m^{(1,2)}$ — нормированные в. ф. состояний систем с моментом l и его проекций m на ось z . Для нее очевидно

$$\hat{L}_{\pm} \Psi_{L=0} = (\hat{l}_{1\pm} + \hat{l}_{2\pm}) \Psi_{L=0} = 0, \quad (1)$$

где $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hat{l}_{1\pm} + \hat{l}_{2\pm}$. Учитывая соотношение (см. (III.8)) $\hat{l}_{+} \Psi_{l,m} = \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \Psi_{l,m+1}$, из (1) после простых преобразований получаем

$$\hat{L}_{+} \Psi_{L=0} = \sum_m \sqrt{(l-m)(l+m+1)} (C_m + C_{m+1}) \Psi_{m+1}^{(1)} \Psi_{-m}^{(2)} = 0.$$

Отсюда $C_{m+1} = -C_m$, так что $|C_m| = \text{const} = (2l+1)^{-1/2}$ — из условия нормировки в. ф. $\Psi_{L=0}$ на единицу. Таким образом, в состоянии с $L = 0$ вероятности различных значений проекций

складываемых моментов на ось z (и на произвольную ось вообще) одинаковы и равны $\omega = (2l + 1)^{-1}$.

Вид в. ф. $\Psi_{L=0}$ в $l_{1z}l_{2z}$ -представлении следует непосредственно из того, что в этом представлении $\Psi_m^{(1,2)} = \delta_{l_1(2)z, m}$. В координатном же представлении $\Psi_m^{(1,2)} = Y_{lm}(\mathbf{n}_{1,2})$. Учитывая, что $C_m = (-1)^{l-m} (2l + 1)^{-1/2}$, соотношение между шаровыми функциями $Y_{lm}^*(\mathbf{n}) = (-1)^{l-m} Y_{l, -m}(\mathbf{n})$ и теорему сложения для них (III. 6), находим

$$\Psi_{L=0} = \sum_m (2l + 1)^{-1/2} Y_{l, m}(\mathbf{n}_1) Y_{l, -m}^*(\mathbf{n}_2) = \frac{\sqrt{2l + 1}}{4\pi} P_l(\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2).$$

Отметим, что такой вид в. ф. $\Psi_{L=0}$ вытекает также из следующих соображений. В силу того, что в. ф. не изменяется при вращениях ($L = 0$), она является скаляром, т. е. функцией вида $\Psi_{L=0} = f(\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2)$. При этом то обстоятельство, что $f(x)$ сводится к полиному Лежандра $P_l(x)$, связано с тем, что складываемые моменты имеют определенное значение l (сравнить, например, с 3.13).

3.35. В $l_{1z}l_{2z}$ -представлении в. ф. $\Psi_{2, \pm 2}$ очевидны:

$$\Psi_{2, 2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \quad \Psi_{2, -2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \quad (1)$$

(здесь и ниже столбцы $\Psi_{1(2)} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \\ c_{-1} \end{pmatrix}_{1(2)}$ представляют в. ф. 1(2)

частицы, или подсистемы, с моментом $l = 1$ в ее l_z -представлении). Вид в. ф. Ψ_{LM} , отвечающих состояниям с $L = 1, 2$ и $M = \pm 1$, а также $L = 1, M = 0$, непосредственно следует из характера симметрии в. ф. по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 , установленного в 3.30:

$$\Psi_{2(1), 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \pm \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}, \quad (2)$$

$$\Psi_{2(1), -1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \pm \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \right\}, \quad (3)$$

$$\Psi_{1, 0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \quad (4)$$

(знак «+» в (2), (3) отвечает $L = 2$, «-» отвечает $L = 1$).

Вид в. ф. $\Psi_{0,0}$ следует из результата предыдущей задачи

$$\Psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}. \quad (5)$$

В. ф. $\Psi_{2,0}$, при учете ее симметричности по отношению к перестановке m_1 и m_2 , можно записать в виде

$$\Psi_{2,0} = C_1 \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} + C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \quad (6)$$

а из условия ее ортогональности в. ф. $\Psi_{0,0}$ найти $C_2 = 2C_1$; выбрав при этом в (6) $C_1 = 1/\sqrt{6}$, $C_2 = 2/\sqrt{6}$, получаем нормированную в. ф. $\Psi_{2,0}$. Вероятности различных значений проекций складываемых моментов на ось z в состояниях Ψ_{LM} непосредственно следуют из установленного вида (1)–(6) в. ф.

3.36. Так как в случае $l_1 = l_2 = 1$ оператор $\hat{I}_1 \hat{I}_2$ имеет в состояниях с определенным L следующие значения: 1 при $L = 2$, -1 при $L = 1$ и -2 при $L = 0$, то оператор, проектирующий на состояние с $L = 0$, имеет вид $\hat{P}(L=0) = ((\hat{I}_1 \hat{I}_2)^2 - 1)/3$ (сравнить с 1.35). Подействовав этим оператором на произвольную в. ф. Ψ состояния с $l_1 = l_2 = 1$, получим (ненормированную) с. ф. оператора квадрата суммарного момента, отвечающую $L = 0$, т. е. $\Psi_{L=0} = C \hat{P}(L=0) \Psi$ (C — нормировочный коэффициент). Записав

$$\hat{I}_1 \hat{I}_2 = \hat{I}_{1z} \hat{I}_{2z} + (\hat{I}_{1+} \hat{I}_{2-} + \hat{I}_{1-} \hat{I}_{2+})/2$$

(вид \hat{I}_{\pm} для $l = 1$ приведен в 3.22) и выбрав для удобства

в. ф. в $l_1 l_2 z$ -представлении в виде $\Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2$, находим

после простых преобразований

$$\begin{aligned} \Psi_{L=0} &= C \hat{P}(L=0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = \\ &= \frac{C}{3} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}. \end{aligned}$$

Выбрав $C = \sqrt{3}$, получаем уже нормированную в. ф. состояния с $L = 0$ в согласии с результатом задачи 3.34.

3.37. Всего имеется $3 \cdot 3 \cdot (2l + 1) = 9(2l + 1)$ независимых состояний. Классификация их по значениям суммарного момента L представлена в таблице

L	$l + 2$	$l + 1$	l	$l - 1$	$l - 2$
Число состояний	$2l + 5$	$2 \cdot (2l + 3)$	$3 \cdot (2l + 1)$	$2 \cdot (2l - 1)$	$(2l - 3)$

Для решения задачи удобно сначала сложить моменты двух подсистем, имеющих $l=1$, в их результирующий момент L_{12} , принимающий значения 0, 1, 2, а затем сложить L_{12} и $l_3 = l$ в суммарный момент L всей системы. При этом следует учесть, что данное значение L можно получить, вообще говоря, несколькими способами. Так, значение $L = l + 1$ можно получить путем сложения с моментом l третьей подсистемы как момента $L_{12} = 1$, так и $L_{12} = 2$. Приведенные результаты относятся к случаю $l \geq 2$; значение $l = 1$ читателю предлагается рассмотреть самостоятельно.

3.38. В данной задаче будем понимать под L его конкретное значение $L = l_1 + l_2$. Очевиден вид в. ф. $\Psi_{LL} = \Psi_{l_1 l_1}^{(1)} \Psi_{l_2 l_2}^{(2)}$. Учитывая свойство оператора \hat{L}_-

$$\hat{L}_- \Psi_{LM} = \sqrt{(L - M + 1)(L + M)} \Psi_{L, M-1},$$

имеем

$$\Psi_{LM} = \left[\frac{(L + M)!}{(L - M)! (2L)!} \right]^{1/2} (\hat{L}_-)^{L-M} \Psi_{LL}. \quad (1)$$

Так как $\hat{L}_- = \hat{l}_{1-} + \hat{l}_{2-}$ и операторы \hat{l}_{1-} и \hat{l}_{2-} коммутируют друг с другом, то из (1) имеем

$$\begin{aligned} \Psi_{LM} &= G(L, M) \sum_m C_{L-M}^m (\hat{l}_{1-})^m (\hat{l}_{2-})^{L-M-m} \Psi_{l_1 l_1}^{(1)} \Psi_{l_2 l_2}^{(2)} = \\ &= G(L, M) \sum_m C_{L-M}^m G^{-1}(l_1, l_1 - m) G^{-1}(l_2, M + m - l_1) \times \\ &\quad \times \Psi_{l_1, l_1 - m}^{(1)} \Psi_{l_2, l_2 - L + M + m}^{(2)} \equiv \sum_{m_1} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM} \Psi_{l_1 m_1}^{(1)} \Psi_{l_2 m_2}^{(2)}, \quad (2) \end{aligned}$$

где введены обозначения

$$G(L, M) = \left[\frac{(L + M)!}{(L - M)! (2L)!} \right]^{1/2}, \quad C_{L-M}^m = \frac{L!}{m! (L - m)!}. \quad (3)$$

Подчеркнем также, что $M = m_1 + m_2$.

Из (2) следуют значения коэффициентов Клебша — Гордана

$$C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM} = G(L, M) G^{-1}(l_1, m_1) G^{-1}(l_2, m_2) C_{L-M}^{l_1 - m_1}.$$

Учитывая (3), находим окончательное выражение ($L = l_1 + l_2$):

$$C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM} = \left[\frac{(2l_1)! (2l_2)! (L+M)! (L-M)!}{(2L)! (l_1+m_1)! (l_1-m_1)! (l_2+m_2)! (l_2-m_2)!} \right]^{1/2}$$

3.39. Коэффициенты Клебша — Гордана для этого случая следуют из результата задачи 3.34. Положив там $C_l = (2l + 1)^{-1/2}$, находим

$$C_{l, m, l, -m}^{0, 0} = C_m = (-1)^{l-m} (2l+1)^{-1/2}.$$

3.40. Рассматриваемые тензорные операторы после усреднения становятся операторами, действующими в пространстве векторов состояний с моментом J . Любой такой оператор должен выражаться через векторный оператор \hat{J}_i и универсальные тензоры δ_{ik} и ε_{ikl} . При этом условии одинакового тензорного характера исходного и усредненного операторов существенно ограничивает вид таких выражений.

а) $\widehat{J}_{1(2)i} = a_{1(2)} \hat{J}_i$ (векторы-вида $\hat{J}_k \hat{J}_i \hat{J}_k$, $\varepsilon_{ikl} \hat{J}_k \hat{J}_l$ и т. д., как это следует из коммутационных соотношений для компонент \hat{J}_i , сводятся к \hat{J}_i). Умножив на \hat{J}_i , находим²⁾ $a_{1(2)} = (j_{1(2)} J) / J(J+1)$; здесь и ниже ради краткости записи скалярные произведения $(j_{1(2)} J)$ и $(j_1 j_2)$, имеющие определенные значения одновременно с j_1^2 , j_2^2 , J^2 , в явном виде не расписываются, см. 3.27.

б) Ввиду антисимметричного характера тензора имеем

$$\widehat{J}_{1i} \widehat{J}_{2k} - \widehat{J}_{1k} \widehat{J}_{2i} = b \varepsilon_{ikl} \hat{J}_l. \quad (1)$$

Умножив обе части этого равенства справа на \hat{J}_k и слева на \hat{J}_i , находим, что при этом левая часть оказывается равной нулю, а правая принимает вид $b \varepsilon_{ikl} J_i J_j J_k = -iJ(J+1)b$, так что $b = 0$.

в) Ввиду симметричности тензора имеем

$$\widehat{J}_{1i} \widehat{J}_{2k} + \widehat{J}_{1k} \widehat{J}_{2i} = A_1 \delta_{ik} + A_2 (\hat{J}_i \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_i). \quad (2)$$

Первый раз, свернув по индексам i и k , а второй — умножив обе части (2) справа на J_k и слева на J_i и воспользовавшись

²⁾ Умножение на \hat{J}_{1i} (или \hat{J}_{2i}) лишено смысла, так как операторы $\hat{J}_{1, 2}$, в отличие от \hat{J} , «перепутывают» состояния с различными значениями J .

равенством $J_i J_k J_i J_k = J^2(J+1)^2 - J(J+1)$, получаем два соотношения

$$3A_1 + 2J(J+1)A_2 = 2(j_1 j_2),$$

$$J(J+1)A_1 + J(J+1)(2J^2 + 2J - 1)A_2 = 2(j_1 J)(j_2 J).$$

Отсюда

$$A_1 = \frac{(4J^2 + 4J - 2)(j_1 j_2) - 4(j_1 J)(j_2 J)}{(2J - 1)(2J + 3)},$$

$$A_2 = \frac{6(j_1 J)(j_2 J) - 2J(J+1)(j_1 j_2)}{J(J+1)(2J - 1)(2J + 3)}.$$
(3)

2) Поступая как и в предыдущем случае, находим

$$\widehat{j_{1i}} \widehat{j_{1k}} + \widehat{j_{1k}} \widehat{j_{1i}} = B_1 \delta_{ik} + B_2 (\widehat{J}_i \widehat{J}_k + \widehat{J}_k \widehat{J}_i),$$

$$B_1 = \frac{j_1(j_1 + 1)(4J^2 + 4J - 2) - 4(j_1 J)^2 + 2(j_1 J)}{(2J - 1)(2J + 3)},$$

$$B_2 = \frac{6(j_1 J)^2 - 2j_1(j_1 + 1)J(J+1) - 3(j_1 J)}{J(J+1)(2J - 1)(2J + 3)}.$$
(4)

При выводе (4) было использовано равенство

$$\widehat{j_{i j_1(2)k}} \widehat{j_{i j_1(2)k}} = (\widehat{j_{i(2)j_1}})^2 - (\widehat{j_{i(2)j_1}}).$$

Для оператора магнитного момента совокупной системы имеем

$$\widehat{\mu}(J) = \widehat{g_1 j_1} + \widehat{g_2 j_2}$$

и согласно результату пункта а) получаем выражение

$$\widehat{\mu}(J) \equiv g(J) \widehat{J} =$$

$$= \frac{(g_1 + g_2)J(J+1) + (g_1 - g_2)[j_1(j_1 + 1) - j_2(j_2 + 1)]}{2J(J+1)} \widehat{J}.$$

3.41. Рассмотрим в. ф. вида

$$\widehat{\Psi}_l = e_{ik \dots n} x_i x_k \dots x_n \equiv e_{ik \dots n} n_i n_k \dots n_n r^l.$$

Учитывая связь оператора \widehat{J}^2 с лапласианом

$$\widehat{J}^2 = -r^2 \Delta_{\theta, \varphi} = r^2 (\Delta_r - \Delta), \quad \Delta_r = r^{-2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r},$$
(1)

находим

$$r^2 \Delta_r \widehat{\Psi}_l = r^2 e_{ik \dots n} n_i n_k \dots n_n \Delta_r r^l = l(l+1) \widehat{\Psi}_l,$$

$$\Delta \widehat{\Psi}_l = (\partial/\partial x_m) (\partial/\partial x_m) e_{ikp \dots n} x_i x_k x_p \dots x_n =$$

$$= e_{ikp \dots n} (\delta_{im} \delta_{km} x_p \dots x_n + \dots) = e_{mmp \dots n} x_p \dots x_n + \dots = 0.$$
(2)

Из (1) и (2) следует $\widehat{I}^2 \widetilde{\Psi}_l = l(l+1) \widetilde{\Psi}_l$ (очевидно, в. ф. Ψ_l , указанная в условии задачи, также является с. ф. \widehat{I}^2).

Сначала найдем число независимых компонент $\tilde{g}(l)$ у симметричного по любой паре индексов тензора $\tilde{e}_{ik \dots n}$ ранга l . Обозначим: n_1 — число индексов некоторой компоненты этого тензора, равных 1, n_2 — равных 2 и $n_3 = (l - n_1 - n_2)$ — равных 3. В силу симметрии тензора его компоненты с одинаковыми числами n_1 и n_2 равны. При фиксированном значении n_1 число n_2 может быть равным 0, 1, ..., $l - n_1$, так что число различных компонент при данном n_1 равно $(l - n_1 + 1)$. Общее число различных компонент

$$\tilde{g}(l) = \sum_{n_1=0}^l (l - n_1 + 1) = (l+1)^2 - \sum_{n_1=0}^l n_1 = \frac{(l+1)(l+2)}{2}.$$

Число же независимых компонент $g(l)$ у симметричного тензора ранга l с равным нулю следом вытекает из того, что равенство $\tilde{e}_{iik \dots n} = 0$ представляет совокупность из $\tilde{g}(l-2)$ линейных соотношений между компонентами $\tilde{e}_{ik \dots n}$, так что $g(l) = \tilde{g}(l) - \tilde{g}(l-2) = 2l + 1$.

Из сравнения выражения $\Psi_{l-1, m} = (\varepsilon(m) \mathbf{n})$ с (III.7) находим

$$\varepsilon(0) = \sqrt{3/4\pi} (0, 0, i), \quad \varepsilon(\pm 1) = \sqrt{3/8\pi} (\mp i, 1, 0). \quad (3)$$

Аналогично, в случае $l = 2$ находим компоненты тензора $\varepsilon_{ik}(m)$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ik}(2) &= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ i & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \varepsilon_{ik}(1) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & i \\ 1 & i & 0 \end{pmatrix}, \\ \varepsilon_{ik}(0) &= \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{ik}(-1) = -\varepsilon_{ik}^*(1), \\ & \quad \varepsilon_{ik}(-2) = \varepsilon_{ik}^*(2). \end{aligned} \quad (4)$$

3.42. а) Так как

$$|\varepsilon \mathbf{n}|^2 = \varepsilon_i \varepsilon_k^* n_i n_k \quad \text{и} \quad \int n_i n_k d\Omega = 4\pi \delta_{ik}/3,$$

то для нормировки в. ф. на 1 следует выбрать $\varepsilon = \sqrt{3/4\pi} \mathbf{a}$, где $|\mathbf{a}| = 1$.

$$\begin{aligned} б) \overline{n_i n_k} &= \varepsilon_i^* \varepsilon_n \int n_l n_i n_k n_n d\Omega = \\ &= \varepsilon_i^* \varepsilon_n \frac{4\pi}{15} (\delta_{ik} \delta_{ln} + \delta_{in} \delta_{kl} + \delta_{il} \delta_{km}) = \frac{1}{5} (\delta_{ik} + a_i^* a_k + a_k^* a_i). \end{aligned}$$

в) Так как $\hat{l}_i \Psi_{l-1} \equiv -ie_{ikn} x_k \partial / \partial x_n (\mathbf{e}_m x_m / r) = -ie_{ikn} \mathbf{e}_n n_k$,
то

$$\bar{l}_i = -ie_{ikn} \mathbf{e}_m^* \mathbf{e}_n \int n_m n_k d\Omega = -ie_{ikn} a_k^* a_n,$$

т. е. $\bar{\mathbf{l}} = -i[\mathbf{a}^* \mathbf{a}]$, или, положив $\mathbf{a} = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$ ($\mathbf{a}_{1,2}$ — вещественные векторы, причем $\mathbf{a}_1^2 + \mathbf{a}_2^2 = 1$), $\bar{\mathbf{l}} = 2[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2]$.

г) Имея в виду, что $\mathbf{e} = \sqrt{3/4\pi} (\mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2)$, легко сообразить, что в случае если $\mathbf{a}_1 \parallel \mathbf{a}_2$, проекция момента на ось, направленную вдоль $\mathbf{a}_{1,2}$, имеет определенное значение $\tilde{m} = 0$; если же $\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2$ и при этом $a_1 = a_2$, то проекция момента на ось, направленную вдоль вектора $[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2]$, имеет определенное значение $\tilde{m} = +1$ (и $\tilde{m} = -1$ на противоположное направление).

3.43. Записав в. ф. в виде $\Psi = \sqrt{3/4\pi} (\mathbf{a} \mathbf{n})$, $|\mathbf{a}|^2 = 1$, имеем $w(\tilde{m} = 0) = |(\mathbf{a} \mathbf{n}_0)|^2$, $w(\tilde{m} = \pm 1) = |(\mathbf{a} \mathbf{n}_1) \mp i(\mathbf{a} [\mathbf{n}_0 \mathbf{n}_1])|^2/2$. (1)

Здесь \mathbf{n}_1 — единичный вещественный вектор, перпендикулярный \mathbf{n}_0 (выбор \mathbf{n}_1 неоднозначен, однако от конкретного его выбора значения выражений (1) не зависят). Записав $\mathbf{a} = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$, где $\mathbf{a}_{1,2}$ — вещественные векторы, замечаем, что вероятность значения проекции $\tilde{m} = 0$ на ось, направленную вдоль вектора $[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2]$ равна нулю. Если $\mathbf{a}_1 \parallel \mathbf{a}_2$, то проекция момента на любую ось, перпендикулярную \mathbf{a}_1 , не может принимать значения $\tilde{m} = 0$.

3.44. Действие оператора $\hat{l}_i = -ie_{ikn} x_k \partial / \partial x_n$ на в. ф. вида $\Psi = (\mathbf{a} \mathbf{n})$ дает

$$\Phi_i \equiv \hat{l}_i \Psi = \hat{l}_i a_m n_m = -ie_{ikm} a_m n_k \equiv b_{i,k} n_k,$$

что эквивалентно соотношению $b_{i,k} = \hat{l}_i a_k \equiv -ie_{ikm} a_m$ в векторном представлении, и если в этом представлении записывать

в. ф. в виде столбца $\Psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$, то операторами компонент

момента являются матрицы \hat{l}_i с элементами $(\hat{l}_i)_{kn} = -ie_{ikn}$:

$$\hat{l}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Легко убедиться, что коммутационные соотношения для этих матриц имеют стандартную форму, т. е. $[\hat{l}_i, \hat{l}_k] = ie_{ikl} \hat{l}_l$, а матрица $\hat{\mathbf{l}}^2$ равна $\hat{\mathbf{l}}^2 = 2 \cdot \hat{\Gamma}$ ($\hat{\Gamma}$ — единичная матрица). Вид унитарной матрицы U , связывающей векторное и l_z -представления: $\mathbf{a}_k = \sum_m U_{km} c_m$, читателю предлагается найти самостоятельно.

3.45. а) Наиболее общий вид угловой зависимости в. ф. следующий: $\Psi = a_{ik}n_{1i}n_{2k}$, где $\mathbf{n}_1 = \mathbf{r}_1/r_1$, $\mathbf{n}_2 = \mathbf{r}_2/r_2$, a_{ik} — произвольный тензор второго ранга, имеющий девять независимых компонент, что соответствует девяти независимым состояниям системы из двух частиц с моментами $l_1 = l_2 = 1$.

б) Представив тензор a_{ik} в виде

$$a_{ik} = a_{nn}\delta_{ik}/3 + (a_{ik} - a_{ki})/2 + (a_{ik} + a_{ki} - 2/3a_{nn}\delta_{ik})/2, \quad (1)$$

запишем указанную выше в. ф. следующим образом:

$$\Psi = C(\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2) + \varepsilon[\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2] + \varepsilon_{ik}n_{1i}n_{2k}, \quad (2)$$

где

$$C = a_{nn}/3, \quad \varepsilon_{ik} = [a_{ik} + a_{ki} - 2/3a_{nn}\delta_{ik}]/2,$$

$$2\varepsilon_i = \varepsilon_{ikl}a_{ik}, \quad a_{ik} - a_{ki} = 2\varepsilon_{ikl}\varepsilon_l$$

(ε_{ik} — симметричный тензор с равным нулю следом).

Имея в виду результат задачи 3.41, нетрудно сообразить, что запись в. ф. в форме (2) является представлением ее в виде трех слагаемых, каждое из которых отвечает определенному значению суммарного момента системы $L = 0, 1, 2$ соответственно. При этом выражение для $\Psi_{L=0} = C(\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2)$ согласуется, естественно, с результатом 3.34 для $l = 1$.

в) Для того чтобы в. ф. Ψ_L в (2) отвечали состояниям с определенным значением M проекции суммарного момента на ось z , компоненты вектора $\varepsilon_i(M)$ и тензора $\varepsilon_{ik}(M)$ должны быть выбраны в виде, установленном в задаче 3.41. В частности, в. ф. $\Psi_{2,2}$ при этом оказывается имеющей вид

$$\begin{aligned} \Psi_{2,2} &= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin\theta_1 \sin\theta_2 e^{i\varphi_1} e^{i\varphi_2} = \\ &= \sqrt{10\pi/3} Y_{11}(\theta_1, \varphi_1) Y_{11}(\theta_2, \varphi_2) \end{aligned}$$

т. е. действительно является с. ф. (ненормированной) операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z , отвечающей с. з. $L = 2$ и $M = 2$.

3.46. Условия $l_1 = 1$ и $\Lambda = 0$ однозначно определяют зависимость в. ф. от угловых переменных первой частицы в виде $\Psi \propto (\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2)$, где $\mathbf{n}_1 = \mathbf{r}_1/r_1$ и $\mathbf{n}_2 = \mathbf{r}_2/r_2$ (сравнить с 3.18; при этом следует учесть, что проекция Λ суммарного момента на направление радиуса-вектора \mathbf{r}_2 полностью определяется проекцией момента только первой частицы, так как $\mathbf{n}_2\hat{L}_2 \equiv 0$). Так как $(\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2)$ является скаляром, как и в. ф. состояния с $J = 0$, то $\Psi_{000} = \text{const}(\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2)$.

В. ф. состояния с $J = 1$ представляет линейную комбинацию компонент вектора, зависящего только от \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 (сравнить с 3.41). При $l_1 = 1$ и $\Lambda = 0$ единственным таким вектором

является $\psi = A(n_1 n_2) n_2$. Составляя из его компонент линейные комбинации, отвечающие проекции момента J_z , находим

$$\Psi_{1J_z 0} = C(n_1 n_2) Y_{1J_z}(n_2) \quad (1)$$

(Y_{1J_z} — шаровые функции). В. ф. (1) имеет определенную четность, равную -1 , и, как нетрудно сообразить, описывает состояние, в котором момент второй частицы может принимать лишь два значения: 0 и 2.

Обобщение выражения (1) на случай произвольных значений l_1, J, J_z и $\Lambda = 0$ имеет вид

$$\Psi_{JJ_z 0} = C P_l(n_1 n_2) Y_{JJ_z}(n_2), \quad (2)$$

где $P_l(z)$ — полином Лежандра.

3.47. В. ф. состояния с $L = 0$ не изменяется при вращениях системы координат, т. е. является скалярной (или псевдоскалярной, в зависимости от четности состояния) функцией. В с. ц. и. трех частиц независимыми являются радиусы-векторы $\mathbf{r}_{1,2}$ лишь двух частиц, при этом $\mathbf{r}_3 = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ (считаем для простоты массы всех частиц одинаковыми). Из двух векторов $\mathbf{r}_{1,2}$ можно образовать следующие скалярные величины: $r_1^2, r_2^2, \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2$, являющиеся истинными скалярами (а не псевдоскалярами!). Скалярная функция, зависящая от векторов $\mathbf{r}_{1,2}$, может быть функцией только указанных скаляров. Соответственно в. ф. является функцией вида $\Psi_{L=0} = f(r_1^2, r_2^2, \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2)$. При инверсии координат $\mathbf{r}_{1,2} \rightarrow -\mathbf{r}_{1,2}$ эта функция не изменяется: $\Gamma \Psi_{L=0} = \Psi_{L=0}$, т. е. состояние с $L = 0$ имеет положительную четность³⁾.

Г л а в а 4

ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ

4.1. Уравнение Шрёдингера (IV.5) и граничные условия $\chi(0) = \chi(\infty) = 0$ имеют такой же вид, как в одномерном потенциале. Соответственно $E_{n_r 0} = E_{n_r}$ (спектры совпадают) и $\Psi_{n_r 0}(r) = \Psi_{n_r}(r) / \sqrt{4\pi r}$, $n_r = 0, 1, \dots$. В частности, в случае а) имеем $E_{n_r 0} = \hbar^2 \pi^2 (n_r + 1)^2 / 2ma^2$ (сравнить с 2.1). В случае б) условие существования связанных s -состояний (а тем са-

³⁾ Подчеркнем, что речь идет об *орбитальной* четности. Заметим также, что если число частиц в системе превышает 3, то появляется возможность образовать псевдоскалярную величину вида $\mathbf{r}_1 [\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3]$. Соответственно состояния таких систем с $L = 0$ могут иметь уже любую четность.

мым и связанных состояний вообще) имеет вид $U_0 > \hbar^2 \pi^2 / 8ma^2$ (сравнить с 2.14).

4.2. а) Так как уравнение (IV.5) имеет вид одномерного у.Ш., то как и в одномерном случае, можно утверждать, что $E_{n_r l}$ (при фиксированном l) возрастает с ростом n_r .

б) Рассматривая в у.Ш. (IV.5) формально l как непрерывный параметр, согласно формуле (I.6) имеем

$$\partial E_{n_r l} / \partial l = \overline{\partial \hat{H} / \partial l} = \overline{\hbar^2 (2l + 1) / 2mr^2} > 0,$$

что доказывает возрастание $E_{n_r l}$ с ростом l .

4.3. а) Имея в виду возрастание $E_{n_r l}$ с ростом l (при фиксированном n_r , см. 4.2), легко сообразить, что независимо от конкретного вида $U(r)$, в N -м состоянии д.с. значение момента частицы не может превышать $l_{\max} = N - 1$ (для такого момента значение $n_r = 0$).

б) Максимальная кратность вырождения уровня получается в случае, когда этому уровню соответствуют состояния со значениями l от 0 до l_{\max} и равна

$$g_{\max}(N) = \sum_{l=0}^{N-1} (2l + 1) = N^2 \quad (1)$$

(такая ситуация реализуется в кулоновском потенциале). При этом состояниям с данным значением l отвечает $n_r = N - 1 - l$.

в) Так как четность $I = (-1)^l$, то теперь суммирование в (1) следует проводить по значениям l определенной четности (четным или нечетным), такой же как и $l_{\max} = N - 1$. В этом случае находим $\bar{g}_{\max}(N) = N(N + 1)/2$, причем состояниям с данным l отвечает $n_r = (l_{\max} - l)/2$ (такая ситуация реализуется у сферического осциллятора, см. 4.4 и 4.5).

4.4. Используя соображения, высказанные при решении задачи 2.48 о плоском осцилляторе, находим решение в виде

$$\Psi_{n, n_2, n_3}(\mathbf{r}) = \Psi_{n_1}^{\text{осц}}(x) \Psi_{n_2}^{\text{осц}}(y) \Psi_{n_3}^{\text{осц}}(z); \quad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots, \quad (1)$$

$$E_n = \hbar\omega (n + 3/2), \quad n = n_1 + n_2 + n_3, \quad n = 0, 1, \dots$$

Уровни осциллятора имеют определенную четность, равную $I_n = (-1)^n$, и кратность вырождения (сравнить с 3.41)

$$g(n) = \sum_{n_1=0}^n (n - n_1 + 1) = (n + 1)(n + 2)/2.$$

Отличие $g(n)$ от характерного для центральных потенциалов значения $g_l = 2l + 1$ свидетельствует о наличии «случайного» вырождения уровней. Имея в виду результат предыдущей

задачи, можно классифицировать независимые состояния, отвечающие данному n , по квантовым числам n_r и l только на основании полученных значений $g(n)$ и I_n (в условиях 4.3 $N = n + 1$): уровню E_n соответствуют состояния с $n_r = 0, l = n; n_r = 1, l = n - 2; n_r = 2, l = n - 4; \dots$ (см. также 4.5).

4.5. У. Ш. (IV. 2) для $U = kr^2/2$ заменой переменной $x = \sqrt{km} r^2/\hbar$ приводится к виду ($\omega = \sqrt{k/m}$)

$$\left\{ x \frac{d^2}{dx^2} + \frac{3}{2} \frac{d}{dx} + \left[\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{l(l+1)}{4x} - \frac{x}{4} \right] \right\} R_{n_r, l} = 0. \quad (1)$$

Подстановкой $R_{n_r, l} = e^{-x/2} x^{l/2} \omega(x)$ преобразуем (1) к гипергеометрическому уравнению

$$x\omega'' + (l + 3/2 - x)\omega' + (E/2\hbar\omega - l/2 - 3/4)\omega = 0. \quad (2)$$

Так как $R \propto r^l \propto x^{l/2}$ при $r \rightarrow 0$, то решение уравнения (2) следует выбрать в виде

$$\omega = cF(-E/2\hbar\omega + l/2 + 3/4, l + 3/2, x), \quad (3)$$

где $F(\alpha, \beta, x)$ — вырожденная гипергеометрическая функция. При этом условии убывания в.ф. при $r \rightarrow \infty$ требует, чтобы функция (3) сводилась к полиному (иначе $F \propto e^x$ и $R \propto e^{x/2}$ при $x, r \rightarrow \infty$). Отсюда

$$-E/2\hbar\omega + l/2 + 3/4 = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots,$$

что непосредственно определяет энергетический спектр:

$$E_{n_r, l} = \hbar\omega(l + 2n_r + 3/2) \equiv \hbar\omega(n + 3/2),$$

$$n = 2n_r + l = 0, 1, 2, \dots$$

Уровню с данным n отвечают состояния с моментом $l = n, n - 2, \dots$, так что он имеет определенную четность $I_n = (-1)^n$, а его кратность вырождения, $g(n) = \sum (2l + 1)$, оказывается равной $g(n) = (n + 1)(n + 2)/2$, в согласии с результатом предыдущей задачи.

4.6. В. ф. имеет вид $\Psi_0 = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$, $a = \hbar^2/m_e e^2$.

$$a) \quad \overline{r^n} = \int r^n |\Psi_0(r)|^2 dV = \frac{(n+2)!}{2} \left(\frac{a}{2}\right)^n. \quad (1)$$

$$б) \quad \overline{U(r)} = - \int \frac{e^2}{r} |\Psi_0(r)|^2 dV = -e^2/a. \quad (2)$$

Так как $\overline{T} + \overline{U} = E_0 = -e^2/2a$, то $\overline{T} = e^2/2a = -\overline{U}/2$.

в) В. ф. в импульсном представлении

$$\Phi_0(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \Psi_0(r) dV = \frac{2\sqrt{2}\hbar^{5/2}}{\pi a^{5/2}} \left(p^2 + \frac{\hbar^2}{a^2} \right)^{-2} \quad (3)$$

определяет распределение по импульсам электрона: $d\omega = |\Phi_0(p)|^2 d^3p$.

г) Искомый потенциал $\varphi(r)$ представляет электростатический потенциал системы, характеризуемой плотностью заряда

$$\rho(r) = e\delta(r) - e|\Psi_0(r)|^2,$$

здесь первое слагаемое соответствует ядру — протону (в начале координат), а второе — электронному «облаку». Уравнение Пуассона [27] $\Delta\varphi = -4\pi\rho$ при $r \neq 0$ принимает вид

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} = \frac{4er}{a^3} e^{-2r/a},$$

где $\chi = r\varphi(r)$. Интегрируя это уравнение с учетом граничных условий $\chi(\infty) = 0$ и $\chi'(\infty) = 0$, получаем

$$\chi(r) = \frac{4e}{a^3} \int_r^\infty dr' \int_{r'}^\infty r'' e^{-2r''/a} dr''.$$

Отсюда

$$\varphi(r) = \chi/r = e \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{a} \right) e^{-2r/a}. \quad (4)$$

4.7. Имея в виду формулу (4) из 4.6, находим

$$\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{R}) = -\nabla\varphi(R) \underset{R \gg a}{\approx} \frac{2e\mathbf{R}}{a^2 R} e^{-2R/a}, \quad (1)$$

т. е. (среднее) поле убывает экспоненциально.

Так как поле $\mathcal{E}(\mathbf{R})$, создаваемое протоном (в начале координат) и электроном (в точке \mathbf{r}), имеет вид

$$\mathcal{E}(\mathbf{R}) = \frac{e\mathbf{R}}{R^3} - \frac{e(\mathbf{R} - \mathbf{r})}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^3} \underset{R \gg r}{\approx} \frac{er(\mathbf{n} - 3\mathbf{N}(\mathbf{n}\mathbf{N}))}{R^3},$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $\mathbf{N} = \mathbf{R}/R$, то

$$\overline{\mathcal{E}_i(\mathbf{R}) \mathcal{E}_k(\mathbf{R})} = \frac{e^2}{R^6} \iint |\Psi_0(r)|^2 r^4 (n_i - 3N_i n_l N_l) \times \\ \times (n_k - 3N_k n_m N_m) dr d\Omega_{\mathbf{n}} = e^2 a^2 (\delta_{ik} + 3N_i N_k) R^{-6} \quad (2)$$

(усреднение проводится по положениям электрона в основном состоянии атома водорода). Таким образом, флуктуационные значения электрического поля убывают лишь по степенному

закону: $\overline{\mathcal{E}^2(R)}^{1/2} \propto R^{-3}$. Это обстоятельство проявляется в том, что взаимодействие атомов (и молекул) на больших расстояниях (например, силы Ван-дер-Ваальса) убывает степенным, а не экспоненциальным образом.

4.8. Спектр дискретен при $E < 0$; ниже $\kappa = \sqrt{-2mE_{n,r0}/\hbar^2}$.

а) С учетом граничных условий при $r = 0$ и $r = \infty$, решение уравнения (IV.5) для $l = 0$ и $U = -\alpha\delta(r-a)$ имеет вид

$$\chi_{n,r0} = \begin{cases} A \operatorname{sh} \kappa r, & r < a, \\ B e^{-\kappa r}, & r > a. \end{cases}$$

Условия сшивания в. ф. в точке $r = a$, аналогичные установленным в 2.6, приводят к соотношению

$$\hbar^2 \kappa / m \alpha = (1 - e^{-2\kappa a}),$$

определяющему спектр¹⁾ s -уровней. При $\xi \equiv m\alpha a / \hbar^2 < 1/2$ это уравнение не имеет корней, так что связанные состояния отсутствуют. При $\xi > 1/2$ имеется, причем только один, s -уровень. Его энергия

$$\begin{aligned} E_0 &\approx -(\hbar^2/2ma^2)(2m\alpha a/\hbar^2 - 1)^2 && \text{при } \xi - 1/2 \ll 1, \\ E_0 &\approx -m\alpha^2/2\hbar^2 && \text{при } \xi \gg 1. \end{aligned} \quad (1)$$

б) Уравнение (IV.5) подстановкой $x = \exp(-r/2a)$ сводится к уравнению Бесселя

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} + \left(\lambda^2 - \frac{p^2}{x^2} \right) \right] \chi_{n,r0} = 0, \quad (2)$$

где $p = 2\kappa a$, $\lambda = (8mU_0 a^2 / \hbar^2)^{1/2}$. Условие обращения в. ф. в нуль при $r \rightarrow \infty$ (при этом $x \rightarrow 0$) требует выбора решения уравнения (2) в виде $\chi_{n,r0} = c J_p(\lambda x)$. При этом условие $\chi(0) = 0$ приводит к соотношению

$$J_p(\lambda) = 0, \quad \text{или} \quad J_{2\kappa a}(\sqrt{8mU_0 a^2 / \hbar^2}) = 0, \quad (3)$$

определяющему спектр s -уровней.

В условиях, когда уровень при углублении потенциальной ямы только появился, его энергия сколь угодно мала. Соответственно условие $J_0(\lambda) = 0$ определяет значения параметров ямы, отвечающих появлению новых состояний д.с. при ее углублении. Отсюда для N -го по счету уровня $U_{0,N} = \hbar^2 x_N^2 / 8ma^2$, где x_N есть N -й нуль функции $J_0(x)$. Так как $x_1 \approx 2,40$, то условие существования s -состояний д.с. (а тем самым и связанных состояний вообще) имеет вид $U_0 \geq 0,72\hbar^2 / ma^2$.

¹⁾ Сравнить, имея в виду результат 4.1, со спектром нечетных уровней в условиях задачи 2.18.

При $0 < (\lambda - x_N) \ll 1$ самый верхний s -уровень «мелкий». Используя формулы (J , N — функции Бесселя и Неймана)

$$J'_0(x) = -J_1(x) \quad \text{и} \quad ((\partial/\partial v) J_\nu(x))_{v=0} = (\pi/2) N_0(x),$$

согласно (3) находим его энергию ($n_r = N - 1$):

$$E_{n_r, 0} \approx - \frac{\hbar^2}{2\pi^2 m a^2} \frac{J_1^2(x_N)}{N_0^2(x_N)} \left(\sqrt{\frac{8mU_0 a^2}{\hbar^2}} - x_N \right)^2. \quad (4)$$

в) Уравнение (IV.5) при $l = 0$ заменой переменной $x = e^{-r/a}$ (при этом $U = -U_0 x / (1 - x)$) и подстановкой $\chi_{n_r, 0} = x^\varepsilon y$, $\varepsilon = \kappa a$ приводится к уравнению для гипергеометрической функции $F(\alpha, \beta, \gamma, x)$:

$$(1 - x) x y'' + (2\varepsilon + 1)(1 - x) y' + \lambda^2 y = 0 \quad (5)$$

с параметрами

$$\begin{aligned} \lambda &= (2ma^2 U_0 / \hbar^2)^{1/2}, & \gamma &= 2\varepsilon + 1, \\ \alpha &= \varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + \lambda^2}, & \beta &= \varepsilon - \sqrt{\varepsilon^2 + \lambda^2}. \end{aligned}$$

Условие обращения в. ф. в нуль при $r \rightarrow \infty$ ($x \rightarrow 0$) требует выбора решения уравнения (5) в виде $y = cF(\alpha, \beta, \gamma, x)$, при этом условие $\chi(r = 0) = \chi(x = 1) = 0$ дает

$$F(\alpha, \beta, \gamma, x = 1) \equiv \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} = 0, \quad (6)$$

что определяет спектр s -уровней. Отсюда, как нетрудно заметить, следует, что $\gamma - \alpha = -n$, где $n \equiv n_r = 0, 1, \dots$, и окончательное выражение для энергии s -уровней принимает вид

$$E_{n_r, 0} = - \frac{\hbar^2}{8ma^2 (n_r + 1)^2} (\lambda^2 - (n_r + 1)^2)^2, \quad (7)$$

причем $n_r < \lambda - 1$. При этом условие $\lambda = N$ (N целое) определяет значения параметров потенциала, соответствующие появлению N -го по счету уровня с $l = 0$ при углублении потенциальной ямы. При $a \rightarrow \infty$ рассматриваемый потенциал переходит в кулоновский, а формула (7) при этом воспроизводит известный спектр (IV.3) в таком потенциале.

4.9. а) Решение уравнения (IV.6) ($\kappa = \sqrt{-2mE_{n_r, l} / \hbar^2}$), учитывающее граничные условия $u(0) = u(\infty) = 0$, для $U = -\alpha\delta(r - a)$ имеет вид

$$u_{n_r, l} = A I_{l+1/2}(\kappa r) \quad \text{при} \quad r < a \quad \text{и} \quad u_{n_r, l} = B K_{l+1/2}(\kappa r)$$

при $r > a$, где I_ν , K_ν — функции Бесселя мнимого аргумента.

Условия сшивания в.ф. в точке $r = a$, такие же как для одномерного δ -потенциала в 2.6, дают

$$I_{l+1/2}(\kappa a) K_{l+1/2}(\kappa a) = \hbar^2/2ma \equiv \xi^{-1}, \quad (1)$$

что определяет энергетический спектр частицы.

Левая часть в (1) при $\kappa \rightarrow 0$, когда уровень имеет сколь угодно малую энергию, принимает вполне определенное значение, равное $(2l+1)^{-1}$. Это означает (как и при $l=0$, см. 4.8a)), что при $\xi \geq \xi_l^{(0)} = (2l+1)$ имеется лишь один дискретный уровень (с данным l). Используя формулы для асимптотик $I_\nu(z)$ и $K_\nu(z)$ при $z \rightarrow 0$ и $z \rightarrow \infty$, из (1) получаем обобщение результата (1) из 4.8 на случай состояний с $l \neq 0$:

$$E_{0l} \approx - \frac{(2l-1)(2l+3)\hbar^2}{4(2l+1)ma^2} (\xi - \xi_l^{(0)}), \quad \xi \rightarrow \xi_l^{(0)}, \quad (2)$$

$$E_{0l} \approx - m\alpha^2/2\hbar^2 + \hbar^2 l(l+1)/2ma^2, \quad \xi \rightarrow \infty.$$

б) Уравнение (IV.6) в рассматриваемой задаче при $r < a$ сводится к уравнению Бесселя. Так как $u_{n_r l}(0) = 0$, то его решение следует выбрать в виде $u_{n_r l} = c J_{l+1/2}(\kappa r)$. При этом условие $u_{n_r l}(a) = 0$ определяет энергетические уровни частицы:

$$E_{n_r l} \equiv \hbar^2 k^2/2m = \hbar^2 \alpha_{n_r+1, l}^2/2ma^2, \quad (3)$$

где α_{nl} — n -й нуль (в порядке возрастания, не считая нуля при $x=0$) функции Бесселя $J_{l+1/2}(x)$.

4.10. В рассматриваемой задаче ($U \equiv 0$ при $r \neq 0$) нормируемое решение у.Ш. при $E < 0$ имеет вид

$$\Psi_0 = Ae^{-\kappa r}/\sqrt{4\pi}r, \quad \text{где} \quad \kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} > 0$$

(оно отвечает частице, имеющей момент $l=0$). При $r \rightarrow 0$ имеем

$$\Psi_0 \approx A(1/r - \kappa + \dots)/\sqrt{4\pi}.$$

Сравнение с соотношением из условия задачи дает $\kappa = \alpha_0$. Таким образом, если $\alpha_0 < 0$, то связанных состояний в потенциале нулевого радиуса нет; при $\alpha_0 > 0$ имеется, и только одно, связанное состояние с энергией $E_0 = -\hbar^2 \alpha_0^2/2m$.

Для нормировки в.ф. этого состояния на единицу следует выбрать $A = \sqrt{2\alpha_0}$. При этом в.ф. в импульсном представлении имеет вид

$$\Phi_0 = \sqrt{\hbar\alpha_0/\pi^2} (p^2 + \hbar^2 \alpha_0^2)^{-1}.$$

Отсюда следует, что $\bar{T} = \overline{p^2}/2m = \infty$, соответственно $\bar{U} = -\infty$ ($\bar{T} + \bar{U} = E_0$).

4.11. Энергетический спектр состояний с $l \neq 0$ такой же, как и в случае одной ямы, см. 4.9б).

При $l = 0$ решение у. Ш., удовлетворяющее условию $\Psi(a) = 0$, имеет вид $\Psi = A \sin k(r-a)/r$. При $r \rightarrow 0$ его асимптотика: $\Psi \approx -A \sin ka(1/r - k \operatorname{ctg} ka)$. Сравнив ее с соотношением из условия задачи 4.10, определяющим п. н. р., получаем уравнение для спектра s-уровней:

$$ka \operatorname{ctg} ka = \alpha_0 a, \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2}. \quad (1)$$

Отсюда при $\alpha_0 = \pm\infty$ следует $ka = (n_r + 1)\pi$, что воспроизводит спектр в яме (см. 4.1), а при $a = \infty$ в случае $\alpha_0 > 0$ имеем $k_0 = i\alpha_0$, т. е. $E_0 = -\hbar^2\alpha_0^2/2m$ — уровень в изолированном п. н. р. (при $E > 0$ спектр уже непрерывный).

Рассмотрим некоторые следствия уравнения (1).

1) При $|\alpha_0 a| \gg 1$ в области значений $ka \ll |\alpha_0 a|$ (не слишком сильно возбужденные уровни) «ямные» уровни испытывают лишь небольшой сдвиг за счет действия п. н. р. Записав при этом $ka = (n_r + 1)\pi + \varepsilon$, где $|\varepsilon| \ll 1$, из (1) находим $E_{n_r,0} \approx E_{n_r,0}^{(0)} \times (1 + 2/\alpha_0 a)$. Если $\alpha_0 > 0$, то имеющийся в п. н. р. уровень также испытывает небольшой сдвиг, равный

$$\Delta E_0 \approx -4e^{-2\alpha_0 a} E_0.$$

2) При $\alpha_0 a \leq 1$ ситуация совершенно иная. При этом у имеющегося в п. н. р. уровня (реального или виртуального) энергия — порядка энергии нижних уровней в яме и, как видно из (1), спектр частицы при совместном действии п. н. р. и ямы сильно отличается от спектров в изолированных п. н. р. и яме: происходит *перестройка* спектра. В частности, при $\alpha_0 = 0$ (когда в п. н. р. имеется уровень с нулевой энергией связи) спектр имеет вид $E_{n_r,0} = \hbar^2\pi^2(n_r + 1/2)^2/2ma^2$. Эта же формула описывает спектр сильно возбужденных уровней и при произвольном α_0 .

4.12. У. Ш. для сепарабельного потенциала удобно решать в импульсном представлении (сравнить с 2.19 и 1.41):

$$\frac{p^2}{2m} \Phi(p) - \lambda g(p) \int g^*(p') \Phi(p') d^3p' = E\Phi(p), \quad (1)$$

$$g(p) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int f(r) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} dV.$$

Из (1) видно, что рассматриваемый потенциал оказывает действие только на частицу с $l = 0$ (в. ф. сферически симметрична). Решение задачи дублирует решение 2.19. В частности, полученные в 2.19 результаты в отношении энергетического спектра связанных состояний полностью переносятся на данную задачу с единственной заменой в них $|g(p)|^2$ на $4\pi p^2 |g(p)|^2 \eta(p)$, где

$\eta(\rho)$ — ступенчатая функция. Так, уравнение для спектра принимает вид

$$2m\lambda \int_0^{\infty} \frac{4\pi\rho^2 |g(\rho)|^2 d\rho}{\rho^2 - 2mE} = 1. \quad (2)$$

Для потенциала Ямагучи $f = e^{-\gamma r}/r$, при этом $g(\rho) = \sqrt{2\hbar/\pi} (\rho^2 + \hbar^2\gamma^2)^{-1}$. Вычисляя интеграл в (2), получаем

$$(\hbar\gamma + \sqrt{2m(-E)})^2 = 4\pi m\lambda/\gamma. \quad (3)$$

Отсюда видно, что единственное связанное состояние возникает при $\lambda > \lambda_0 \equiv \hbar^2\gamma^3/4\pi m$, при этом его энергия

$$E_0 \equiv -\frac{\hbar^2\kappa_0^2}{2m} = -\frac{\hbar^2\gamma^2}{2m} [\sqrt{\lambda/\lambda_0} - 1]^2, \quad (4)$$

а нормированная в. ф. в координатном и импульсном представлениях имеет вид

$$\Phi_0(\rho) = \frac{\sqrt{\hbar^5\kappa_0\gamma(\gamma + \kappa_0)^3}}{\pi(\rho^2 + \hbar^2\kappa_0^2)(\rho^2 + \hbar^2\gamma^2)},$$

$$\Psi_0(r) = \sqrt{\frac{\kappa_0\gamma(\kappa_0 + \gamma)}{2\pi(\gamma - \kappa_0)^2}} \frac{e^{-\kappa_0 r} - e^{-\gamma r}}{r}.$$

4.13. У. Ш. в импульсном представлении имеет вид

$$\frac{p^2}{2m} \Phi(\mathbf{p}) + \int \tilde{U}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \Phi(\mathbf{p}') d^3p' = E\Phi(\mathbf{p}), \quad (1)$$

где

$$\tilde{U}(q) = (2\pi\hbar)^{-3} \int U(r) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/\hbar} dV$$

(сравнить с 2.17). Для δ -потенциала

$$\tilde{U}(q) = -(\alpha a/2\pi^2\hbar^2 q) \sin(aq/\hbar)$$

и уравнение (1), с учетом того, что при $l = 0$ в. ф. не зависит от углов, принимает вид

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right) \Phi(p) =$$

$$= \frac{\alpha a}{\pi\hbar^2} \iint \frac{\sin(a\sqrt{p^2 + \tilde{p}^2 - 2p\tilde{p}\cos\theta}/\hbar)}{\sqrt{p^2 + \tilde{p}^2 - 2p\tilde{p}\cos\theta}} \Phi(\tilde{p}) \tilde{p}^2 \sin\theta d\theta d\tilde{p}, \quad (2)$$

или, после интегрирования по θ :

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right) \Phi(p) = \frac{2\alpha}{\pi\hbar p} \sin\left(\frac{pa}{\hbar}\right) \int_0^{\infty} \sin\left(\frac{\tilde{p}a}{\hbar}\right) \Phi(\tilde{p}) \tilde{p} d\tilde{p}. \quad (3)$$

Отсюда

$$\Phi(p) = \frac{4m\alpha C \sin(pa/\hbar)}{\pi\hbar p(p^2 - 2mE)}, \quad C = \int_0^{\infty} \sin(pa/\hbar) \Phi(p) p dp. \quad (4)$$

Условие согласованности этих выражений приводит к соотношению, определяющему спектр s -уровней ($E = -\hbar^2\kappa^2/2m$):

$$\frac{4m\alpha}{\pi\hbar} \int_0^{\infty} \frac{\sin^2(pa/\hbar) dp}{p^2 - 2mE} = 1, \quad \text{или} \quad \frac{m\alpha a}{\hbar^2} (1 - e^{-2a\kappa}) = a\kappa \quad (5)$$

(для перехода от первого из них ко второму следует заменить $2\sin^2(pa/\hbar)$ на $1 - \cos(2pa/\hbar)$ и вычислить интеграл с помощью вычетов). Приближенное решение уравнения (5) приведено в 4.8а) (см. также 2.18). Здесь же напомним, что единственное связанное s -состояние имеется при условии $m\alpha a/\hbar^2 > 1/2$.

4.14. Решение может быть получено в результате простых замен в формулах решения предыдущей задачи. При этом следует учесть два обстоятельства. 1) Ввиду условия $\Phi(p) = 0$ при $p \leq p_0$ в формулах (2)–(5) нижний предел интегрирования по p (равный нулю) надо заменить на p_0 . 2) Связанному состоянию частицы теперь отвечают значения энергии $E < E_0 = p_0^2/2m$ (а не $E < 0$, как раньше), удовлетворяющие уравнению

$$\frac{4m\alpha}{\pi\hbar} \int_{p_0}^{\infty} \frac{\sin^2(pa/\hbar)}{p^2 - 2mE} dp = 1. \quad (1)$$

Так как левая часть (1) монотонно возрастает с увеличением E от значения, равного нулю при $E \rightarrow -\infty$, до значения $+\infty$ при $E \rightarrow E_0$ (предполагается, что $p_0 \neq \pi\hbar/a$ и, естественно, $\alpha > 0$), то при любых значениях параметров ямы имеется, и только одно, связанное s -состояние.

В случае $\xi = m\alpha a/\hbar^2 \rightarrow 0$ (мелкая яма) из (1) следует, что $E \rightarrow E_0$, при этом значение интеграла определяется областью значений p , прилегающих к нижнему пределу, и приближенно равно

$$\int_{p_0}^{\infty} \frac{\sin^2(pa/\hbar) dp}{p^2 - p_0^2 + 2m\varepsilon} \approx \sin^2(p_0 a/\hbar) \int_{p_0}^{\infty} \frac{dp}{p^2 - p_0^2 + 2m\varepsilon} \approx \frac{\sin^2(p_0 a/\hbar)}{2p_0} \ln \frac{4E_0}{\varepsilon}. \quad (2)$$

Здесь $\varepsilon = E_0 - E > 0$ — энергия связи частицы. Из (1) и (2) при $\xi \ll 1$ следует

$$\varepsilon \sim E_0 \exp[-\pi p_0 a/2\xi\hbar \sin^2(p_0 a/\hbar)] \quad (3)$$

(определение предэкспоненциального множителя в (3) требует более точного вычисления интеграла (2)). Таким образом, при $\xi \rightarrow 0$ энергия связи стремится к нулю по экспоненциальному закону $\propto e^{-c/\xi}$.

4.15. Сначала у. Ш. для $U = -\alpha/x$ на полуоси $x \geq 0$ с граничным условием $\Psi(0) = 0$ запишем в виде такого уравнения, уже на всей оси x , которое при $x \geq 0$ эквивалентно исходному, а при $x < 0$ из него автоматически вытекает условие $\Psi(x) \equiv 0$:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi(x) - \frac{\alpha}{x} \Psi(x) - E\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'(0+) \delta(x) \quad (1)$$

(так как при этом $\Psi(0-) = \Psi(0+) = 0$ и $\Psi'(0-) = 0$, сравнить с 2.6, то $\Psi(x) \equiv 0$ при $x \leq 0$). Имея в виду 1.40, запишем уравнение (1) в импульсном представлении:

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{2m} \Phi(p) + \frac{i\alpha}{\hbar} \int_p^\infty \Phi(p') dp' - E\Phi(p) = \\ = -\frac{\hbar^2}{2\sqrt{2\pi\hbar} m} \Psi'(0+). \end{aligned} \quad (2)$$

Дифференцируя (2) по p , приходим к уравнению с разделяющимися переменными, решение которого имеет вид ($E < 0$)

$$\Phi(p) = \frac{C}{p^2 + 2m|E|} \exp \left\{ \frac{2i\alpha}{\sqrt{2m|E|}\hbar} \operatorname{arctg} \frac{p}{\sqrt{2m|E|}} \right\}, \quad (3)$$

а условие $\Psi(0) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int \Phi(p) dp = 0$ дает спектр уровней:

$$\sin \frac{\pi\alpha}{\sqrt{2m|E|}\hbar} = 0, \text{ или } E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(n+1)^2}, \quad n = 0, 1, \dots \quad (4)$$

Для нормировки с. ф. (3) следует выбрать

$$C = \sqrt{2/\pi} (m\alpha/\hbar (n+1))^{3/2}.$$

Чтобы обобщить полученные «одномерные» результаты на случай s -состояний в кулоновском потенциале, воспользуемся связью в. ф. в координатном представлении

$$\Psi_{n_r,00}(r) = \Psi_{n_r}(r)/\sqrt{4\pi} r,$$

см. 4.1. Переходя к импульсному представлению, получаем

$$\begin{aligned} \Phi_{n_r,00}(p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi_{n_r,00}(r) e^{-ipr/\hbar} dV = \\ &= \frac{i}{\sqrt{8\pi^2\hbar} p} \int_0^\infty \Psi_{n_r}(r) (e^{-ipr/\hbar} - e^{ipr/\hbar}) dr = i \frac{\Phi_{n_r}(p) - \Phi_{n_r}(-p)}{\sqrt{4\pi} p}, \end{aligned} \quad (5)$$

где Φ_{n_r} определяется (3) и (4) с $n \equiv n_r$. Воспользовавшись соотношением

$$\exp(i \operatorname{arctg} \varphi) = (1 + \varphi^2)^{-1/2} + i\varphi (1 + \varphi^2)^{-1/2},$$

перепишем (5) в виде (фазовый множитель (-1) опущен)

$$\Phi_{n_r 00}(p) = \frac{\sqrt{2}}{\pi p} p_{n_r}^{3/2} \frac{\sin [2(n_r + 1) \operatorname{arctg}(p/p_{n_r})]}{p^2 + p_{n_r}^2},$$

$$p_{n_r} = \frac{m\alpha}{\hbar(n_r + 1)} \quad (6)$$

(при $n_r = 0$ и $\alpha = e^2$ отсюда следует результат 4.6в)).

4.16. Воспользовавшись соотношением

$$\int e^{-ikrnn'} Y_{lm}(n') d\Omega_{n'} = (-i)^l 2\pi \sqrt{\frac{2\pi}{kr}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(n), \quad (1)$$

вытекающим из известного разложения плоской волны по полиномам Лежандра и теоремы сложения для последних (III.6), и учтя вид функции Бесселя $J_\nu(z)$ при $z \rightarrow 0$, получаем

$$\Phi_{n_r lm}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-ipr/\hbar} \Psi_{n_r lm}(r) dV \underset{p \rightarrow 0}{\approx} C_l p^l Y_{lm}(p/p),$$

где

$$C_l = \frac{(-i)^l}{2^{l+1/2} \hbar^{l+3/2} \Gamma(l+3/2)} \int_0^\infty r^{l+2} R_{n_r l}(r) dr$$

(сравнить полученный результат $\Phi_l \propto p^l$ при $p \rightarrow 0$ с соотношением $\Psi_l \propto r^l$ при $r \rightarrow 0$).

4.17. Несложный анализ у.Ш. в импульсном представлении

$$\frac{p^2}{2m} \Phi(p) + \int \tilde{U}(p-p') \Phi(p') d^3 p' = E \Phi(p) \quad (1)$$

показывает, что при степенном убывании $\tilde{U}(p) \propto p^{-n}$ при $p \rightarrow \infty$ с $n > 1$, в.ф. $\Phi(p)$ убывает быстрее, чем $\tilde{U}(p)$. При этом доминирующую роль в интеграле в (1) играет область интегрирования $|p'| \leq \hbar/a$, где a — радиус потенциала. Соответственно, вынося $\tilde{U}(p-p')$ за знак интеграла при $p' \approx 0$ и используя связь в.ф. $\Phi(p)$ и $\Psi(r)$, сразу приходим к искомой асимптотике ($l=0$):

$$\Phi(p) \approx -2(2\pi\hbar)^{3/2} m \Psi(0) p^{-2} \tilde{U}(p), \quad p \rightarrow \infty. \quad (2)$$

Еще один вывод формулы (2), допускающий простое обобщение на случай $l \neq 0$, см. в 4.18.

4.18. Сначала преобразуем $U(p)$ к виду (положено $\hbar = 1$):

$$\tilde{U}(p) = (4\pi^2 i p)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} r e^{i p r} U(|r|) dr. \quad (1)$$

Имея в виду общие соображения о характере убывания фурье-компонент при $p \rightarrow \infty$ (см., например [14]), замечаем, что используемые ограничения на потенциал означают, что функция $U(|r|)$ — четное продолжение $U(r)$ на область $r < 0$, рассматриваемая как аналитическая функция r , имеет особую точку $r = 0$. При этом сингулярность $U(r)$ ограничена условием $U(r) r^{2-\varepsilon} \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$, где $\varepsilon > 0$ (для $U = \alpha/r^2$ имеем $\sigma = \alpha/4\pi p$). Если для такого потенциала записать в. ф. связанного состояния в виде

$$\Psi_{n_r l m}(r) = r^l Y_{lm}(r/r) \tilde{R}_{n_r l}(r),$$

то $\tilde{R}_{n_r l}(0) = \text{const} \neq 0$ и $\tilde{R}_{n_r l}(0) < \infty$.

Наличие особенности при $r = 0$ у потенциала проявляется и в радиальной в. ф. $\tilde{R}_{n_r l}(r)$. Существенным, однако, является то обстоятельство, что сингулярность функции $\tilde{R}_{n_r l}$ более слабая, чем у потенциала. Это утверждение является непосредственным следствием у. Ш. В частности, если сингулярная часть $U(r)$ имеет вид $U^{(s)}(r) \approx \alpha r^{\nu}$ (при этом $\nu > -2$ и не равно четному числу, несингулярная часть представляет разложение по целым степеням r^2), то сингулярная часть радиальной функции (см. 4.19)

$$\tilde{R}_{n_r l}^{(s)}(r) \approx \frac{2m\alpha}{(\nu+2)(\nu+2l+3)} \tilde{R}_{n_r l}(0) r^{\nu+2}$$

и обращается в нуль при $r \rightarrow 0$ в отличие от $\tilde{R}_{n_r l}(0)$.

Для дальнейших преобразований удобно записать шаровую функцию в виде (см. 3.41)

$$r^l Y_{lm}(\mathbf{n}) = \varepsilon_{i \dots n}(m) x_i \dots x_n,$$

где $\varepsilon_{i \dots n}$ является симметричным по любой паре индексов тензором ранга l с равным нулю следом $\varepsilon_{ii \dots n} = 0$. Для получения искомой асимптотики умножим обе части у. Ш.

$$\left(-\frac{\Delta}{2m} - E_{n_r l} \right) \Psi_{n_r l m}(r) = -U(r) \Psi_{n_r l m}(r)$$

на $(2\pi)^{-3/2} \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r})$ и, проинтегрировав по координатам, выполним следующее преобразование:

$$\begin{aligned} \left(\frac{p^2}{2m} - E_{n_r l}\right) \Phi_{n_r l m}(\mathbf{p}) &= \\ &= -\frac{\varepsilon_{i \dots n}}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} x_i \dots x_n U(r) \tilde{R}_{n_r l}(r) dV = \\ &= -\frac{i^l}{(2\pi)^{3/2}} \varepsilon_{i \dots n} \frac{\partial}{\partial p_i} \dots \frac{\partial}{\partial p_n} \int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} U(r) \tilde{R}_{n_r l}(r) dV. \end{aligned} \quad (2)$$

При $p \rightarrow \infty$ значение интеграла в (2) определяется наличием у функции $U(r) \tilde{R}_{n_r l}(r)$ особенности при $r = 0$ (точнее, у ее четного продолжения, как и в (1)). При этом наиболее сингулярная часть такой функции, определяющая главный член асимптотики, содержится в $U(r)$. Соответственно, вынося в выражении (2) из-под интеграла $\tilde{R}_{n_r l}(r)$ в точке $r = 0$, используя соотношение

$$\partial \tilde{U}(p) / \partial p_i = 2p_i \partial \tilde{U}(p) / \partial p^2$$

и учитывая равенство нулю следа тензора $\varepsilon_{i \dots n}$, приходим к приведенной в условии задачи асимптотике в. ф.

Имея в виду проделанные вычисления, легко заметить, что полученный результат может быть очевидным образом обобщен и на случай, когда единственными особыми точками четного продолжения потенциала являются точки $r = \pm a$ на вещественной оси (различного рода модельные потенциалы с резко выраженными границами или изломами): для этого в выражении для асимптотики следует заменить $\tilde{R}_{n_r l}(0)$ на $\tilde{R}_{n_r l}(a)$. Однако несмотря на внешне похожий вид асимптотик в этих случаях, между ними имеется существенное различие. Оно связано с тем обстоятельством, что в случае особых точек $r = \pm a \neq 0$ фурье-компонента $\tilde{U}(p)$ содержит быстро осциллирующий множитель вида $\sin(pa)$, наличие которого приводит к тому, что все производные $\tilde{U}(p)$ убывают одинаковым образом, так же как и $\tilde{U}(p)$. Соответственно, в. ф. состояний с различными значениями l при $p \rightarrow \infty$ также убывают одинаковым образом. В случае же особой точки $r = 0$ в. ф. состояния с моментом l убывает тем быстрее, чем больше l .

4.19. Опустив в уравнении (IV.2) члены, содержащие U и E , приходим к главному члену асимптотики:

$$R_{n_r l} \approx R_{n_r l}^{(0)} = C_{n_r l} r^l \quad \text{при } r \rightarrow 0.$$

Для нахождения поправки $R_{n_r l}^{(1)}$ имеем уравнение

$$R_{n_r l}^{(1)''} + \frac{2}{r} R_{n_r l}^{(1)'} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{n_r l}^{(1)} - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} C_{n_r l} r^{l-s} = 0.$$

Отсюда

$$R_{n_r l}^{(1)} = \frac{2m\alpha}{(2-s)(2l+3-s)\hbar^2} C_{n_r l} r^{l+2-s}. \quad (1)$$

При $s < 0$ первая поправка будет определяться уже членом, содержащим энергию. Если $U \equiv 0$, то, как известно, $R = C J_{l+1/2}(kr) / \sqrt{r}$. Разложение этой функции по степеням $(kr)^2$ остается справедливым и при наличии потенциала, но лишь до тех пор, пока степень r не превышает значения $l+2-s$. Следующий затем член разложения опять определяется выражением (1).

4.20. Функция Грина удовлетворяет уравнению

$$\frac{\hbar^2}{2m} (-\Delta + \kappa^2) G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (1)$$

($\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} > 0$). Из соображений симметрии представляется очевидным, что она является функцией вида $G_E = f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. При этом уравнение (1) при $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ и его решение имеют вид

$$\frac{d^2}{dr^2} (rf(r)) - \kappa^2 (rf(r)) = 0, \quad f(r) = Ce^{-\kappa r}/r \quad (2)$$

(экспоненциально растущий член в $f(r)$ опущен). Соотношение $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(\mathbf{r})$ позволяет определить значение C в (2) и окончательный вид G_E :

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (3)$$

С помощью функции Грина у.Ш. для состояний д.с. можно записать в виде интегрального уравнения (сравнить с 2.20):

$$\begin{aligned} \Psi_E(\mathbf{r}) &= - \int G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \Psi_E(\mathbf{r}') dV' = \\ &= - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \Psi_E(\mathbf{r}') dV'. \end{aligned} \quad (4)$$

4.21. Применим уравнение (4) предыдущей задачи к основному состоянию с $E_0 < 0$ (считая, что оно существует). Соответствующая в.ф. $\Psi_0(r)$ сферически симметрична ($l=0$) и так

как она не имеет нулей, то можно считать $\Psi_0(r) \geq 0$. При этом в уравнении

$$\Psi_0(r) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{-\kappa_0 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} [-U(r')] \Psi_0(r') dV' \quad (1)$$

подынтегральное выражение также неотрицательно.

Возьмем в (1) значение $r = r_0$, при котором $\Psi_0(r)$ принимает максимальное значение. После этого, заменив под интегралом $\Psi_0(r')$ на $\Psi_0(r_0)$ и «опустив» экспоненту (от чего его значение может лишь увеличиться), приходим к соотношению

$$\frac{1}{4\pi} \int \frac{|U(r')|}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} (r')^2 dr' d\Omega' \geq \frac{\hbar^2}{2m}. \quad (2)$$

Выполнив здесь интегрирование по углам (выбрав полярную ось вдоль вектора \mathbf{r}), которое дает

$$\int \frac{d\Omega'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \min \left\{ \frac{4\pi}{r}, \frac{4\pi}{r'} \right\} \leq \frac{4\pi}{r'},$$

получаем утверждение задачи (имея в виду 4.1, легко заметить, что результат данной задачи является аналогом результата 2.25 для одномерного движения).

Для прямоугольной ямы необходимое условие существования связанного состояния принимает вид $\xi \equiv ma^2 U_0 / \hbar^2 \geq 1$, а точное: $\xi \geq \pi^2 / 8 \approx 1,24$. Для δ -потенциала необходимое условие совпадает с точным. Для экспоненциальной ямы необходимое условие $\xi \equiv ma^2 U_0 / \hbar^2 \geq 1/2$, а точное $\xi \geq 0,72$.

4.22. Сделаем сначала в уравнении (1) из предыдущей задачи подстановку $\Psi_0 = \chi(r)/r$. Далее, поступая как и при решении этой задачи, выполним интегрирование по углам вектора \mathbf{r}' , выбрав направление \mathbf{r} за полярную ось. При этом

$$\begin{aligned} \int \frac{\exp(-\kappa_0 \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'})}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'}} d\Omega' &= \\ &= \frac{2\pi}{\kappa_0 r r'} [e^{-\kappa_0 |r-r'|} - e^{-\kappa_0 |r+r'|}] = \\ &= \frac{2\pi}{\kappa_0 r r'} e^{-\kappa_0 |r-r'|} (1 - e^{-\kappa_0 (|r+r'| - |r-r'|)}) \leq \frac{2\pi}{\kappa_0 r r'} (1 - e^{-2\kappa_0 r'}) \end{aligned}$$

и так же, как и в предыдущей задаче, получаем

$$\int_0^\infty |U(r)| (1 - e^{-2\kappa_0 r}) dr \geq \hbar^2 \kappa_0 / 2m, \quad (1)$$

что эквивалентно соотношению, приведенному в условии задачи (при этом $\epsilon_0 = \hbar^2 \kappa_0^2 / 2m$).

4.23. Из уравнения и граничных условий следует ($\nu = l + 1/2$):

$$G_{l,E} = \begin{cases} C_1(r') [K_\nu(\kappa a) I_\nu(\kappa r) - I_\nu(\kappa a) K_\nu(\kappa r)], & a \leq r' < r \leq b, \\ C_2(r') [I_\nu(\kappa b) K_\nu(\kappa r) - K_\nu(\kappa b) I_\nu(\kappa r)], & a \leq r' < r \leq b, \end{cases} \quad (1)$$

где I_ν, K_ν — функции Бесселя мнимого аргумента. Из условий при $r = r'$: 1) непрерывности $G_{l,E}$ и 2) равенства скачка производной $\partial G_{l,E} / \partial r$ значению $-2m/\hbar^2$ (сравнить с 2.20), с учетом значения вронскиана $W = [I_\nu(z), K_\nu(z)] = -1/z$, находим

$$C_1(r') = C_\nu [I_\nu(\kappa b) K_\nu(\kappa r') - K_\nu(\kappa b) I_\nu(\kappa r')], \quad (2)$$

$$C_2(r') = C_\nu [K_\nu(\kappa a) I_\nu(\kappa r') - I_\nu(\kappa a) K_\nu(\kappa r')],$$

где

$$C_\nu = \frac{2mr'}{\hbar^2} (K_\nu(\kappa a) I_\nu(\kappa b) - K_\nu(\kappa b) I_\nu(\kappa a))^{-1}. \quad (3)$$

Соотношения (1), (2), (3) определяют вид функции Грина. Так как $K(0) = I(\infty) = \infty$, то при $a = 0$ и (или) $b = \infty$ эти соотношения несколько упрощаются.

4.24. Пусть в. ф. $\Psi_{n_r l m} = Y_{lm} u_{n_r l}(r) / \sqrt{r}$ отвечает n_l -му по счету, самому верхнему уровню с $E_{n_r l} < 0$, при этом $n_r = n_l - 1$, а $u_{n_r l}(r)$ имеет $(n_l + 1)$ нулей, включая $r = 0$ и $r = \infty$, и удовлетворяет уравнению (IV.6). Пусть, далее, a и b представляют соседние нули $u_{n_r l}$. Имея в виду результат предыдущей задачи, замечаем, что $u_{n_r l}$ на отрезке $[a, b]$ удовлетворяет уравнению

$$u_{n_r l}(r) = \int_a^b G_{l,E}(r, r') [-U(r') u_{n_r l}(r')] dr'. \quad (1)$$

На этом отрезке $u_{n_r l}$ не меняет знака и будем считать $u_{n_r l} \geq 0$. Имея в виду монотонность функций $I_\nu(z), K_\nu(z)$ (I_ν возрастает, а K_ν убывает), замечаем, что функция Грина $G_{l,E}$ из 4.23 $G_{l,E} \geq 0$ и $G_{l,E}$ принимает максимальное значение при $r = r'$. Соответственно подынтегральная функция в (1) неотрицательна. Взяв в (1) значение $r = r_0$, отвечающее максимуму $u_{n_r l}$ на отрезке $[a, b]$ и заменив $u_{n_r l}(r')$ под интегралом на $u_{n_r l}(r_0)$ (от чего он может только увеличиться), получаем

$$\int_a^b G_{l,E}(r_0, r') |U(r')| dr' \geq 1. \quad (2)$$

Заменим $G_{l,E}$ в (2) ее максимальным значением при $r_0 = r'$.
Имея в виду формулы (1)–(3) из 4.23, нетрудно получить

$$G_{l,E}(r', r') \geq \frac{2mr'}{\hbar^2} K_\nu(\kappa r') I_\nu(\kappa r') \geq \frac{2mr'}{(2l+1)\hbar^2} \quad (3)$$

(в условиях задачи следует считать κ сколь угодно малым — верхний уровень только появился, соответственно в (3) использованы асимптотики $I_\nu(z)$ и $K_\nu(z)$ при $z \rightarrow 0$). С учетом (3) из (2) следует

$$\int_a^b r(-U(r)) dr \geq (2l+1)\hbar^2/2m, \quad (4)$$

и так как на полуоси $(0, \infty)$ имеется n_l интервалов, на которых $u_{n,l}$ не изменяет своего знака и на каждом из них справедливо аналогичное (4) неравенство, то, суммируя по всем таким интервалам, приходим к утверждению задачи.

4.25. Условию появления нового, N -го по счету связанного состояния с $l=0$ при углублении потенциальной ямы отвечает существование решения у.Ш. с $E=0$, которое является ограниченным при конечных значениях r и имеет при $r \rightarrow \infty$ асимптотику $\Psi(r) \approx C/r$ (при произвольных параметрах потенциала $\Psi \approx A + C/r$ при $r \rightarrow \infty$). Рассмотрим решения у.Ш., удовлетворяющие таким условиям.

а) Уравнение (IV.2) для $U = -\alpha/r^4$ при $l=0$ и $E=0$ заменой переменной $x = 1/r$ приводится к виду

$$d^2R/dx^2 + \bar{\alpha}R = 0, \quad \bar{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2. \quad (1)$$

Решение его, в силу условия при $r \rightarrow \infty$, следует выбрать в виде $R = B \sin(\sqrt{\bar{\alpha}}/r)$. При этом условии $R(a) = 0$ определяет искомые значения параметров потенциала $\sqrt{\bar{\alpha}}/a = \pi N$, или

$$m\alpha/\hbar^2 a^2 = \pi^2 N^2/2. \quad (2)$$

б) Имея в виду уравнение (IV.5) и граничные условия к нему, замечаем, что спектры s -уровней в потенциалах $U_1(r) = f(r+a)$ и $U_2 = f(r)$ при $r > a > 0$ и $U_2 = \infty$ при $r < a$ совпадают (при $l \neq 0$ это утверждение уже не справедливо). Соответственно, искомые значения параметров потенциала определяются формулой (2).

в) Уравнение (IV.5) для $U = -U_0 a^4/(r^2 + a^2)^2$ при $l=0$ и $E=0$ с помощью подстановок $w = \chi/\sqrt{r^2 + a^2}$ и $x = \arctg(r/a)$ принимает вид

$$d^2w/dx^2 + \xi^2 w = 0, \quad \xi = \sqrt{1 + 2mU_0 a^2/\hbar^2}.$$

В силу условия $\chi(r=0) = \omega(x=0) = 0$, его решение следует выбрать в виде $\omega = C \sin \xi x$, или

$$\Psi = C \sqrt{1 + a^2/r^2} \sin(\xi \operatorname{arctg}(r/a)). \quad (3)$$

При $r \rightarrow \infty$ имеем $\operatorname{arctg} r/a \approx \pi/2 - a/r$, так что

$$\Psi \approx C [\sin(\pi\xi/2) - (a\xi/r) \cos(\pi\xi/2)],$$

и условие на асимптотику ($\Psi \propto 1/r$), требующее, чтобы $\sin(\pi\xi/2) = 0$, приводит к искомому соотношению $\xi/2 = N$ (в. ф. (3) при этом имеет $(N-1)$ нулей при конечных r).

Для потенциалов из г) и д) решение уравнения (IV.5) при $l=0$ и $E=0$ согласно (Д2.11) выражается через цилиндрические функции. Приведем лишь ответы (в них x_{vN} есть N -й по счету нуль функции Бесселя $J_v(x)$, не считая нуля при $x=0$):

е)

$$\frac{2}{s-2} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2 a^{s-2}} \right)^{1/2} = x_{vN}, \quad v = 1/(s-2) \quad (4)$$

(при $s=4$ имеем $v=1/2$ и (4) совпадает с (2)); при этом в. ф. в момент появления уровня имеет вид $\Psi = CJ_v(\beta r^{-1/2v})/\sqrt{r}$ (при $r > a$), где $\beta = v \sqrt{8m\alpha/\hbar^2}$; $\Psi = 0$ при $r < a$.

д)

$$2(v+1)(2m\alpha a^{2-s}\hbar^{-2})^{1/2} = x_{vN}, \quad v = -1 + 1/(2-s), \quad (5)$$

а в. ф. в момент появления уровня: $\Psi = CJ_{v+1}(\tilde{\beta} r^{1/2(v+1)})/\sqrt{r}$ при $r < a$ и $\Psi = C \sqrt{a} J_{v+1}(\tilde{\beta} a^{1/2(v+1)})/r$ при $r > a$; здесь $\tilde{\beta} = (v+1) \sqrt{8m\alpha/\hbar^2}$.

В случае $s=1$ («обрезанный» кулоновский потенциал) из (5) следует: $m\alpha a/\hbar^2 = x_{0N}^2/8$. Имея в виду значение $x_{01} \approx 2,40$ первого нуля функции Бесселя $J_0(x)$, находим условие существования связанных состояний в таком потенциале: $m\alpha a/\hbar^2 \geq \geq 0,72$.

4.26. Условию появления нового связанного состояния с моментом l отвечает существование решения у.Ш. с $E=0$, радиальная функция которого имеет при $r \rightarrow \infty$ асимптотику $R \approx \approx Cr^{-l-1}$ (в общем случае $R \approx Ar^l + Cr^{-l-1}$), сравнить с 4.25. При этом в случае $l \neq 0$ в. ф. в момент появления уровня нормируема на 1, т. е. отвечает истинно связанному состоянию.

а) Радиальная в. ф. в момент появления уровня (т. е. при $E=0$) согласно (IV.5) имеет вид $\chi = Ar^{l+1}$ при $r < a$ и $\chi = = Cr^{-l}$ при $r > a$. Сшивание решения в точке $r=a$ согласно 2.6 дает: $C = Aa^{2l+1}$ и $2m\alpha a/\hbar^2 = (2l+1)$, что и определяет условие появления единственного дискретного уровня с момен-

том l при углублении δ -ямы. Отметим, что для нормировки в. ф. в момент возникновения уровня с $l \neq 0$ на 1 следует выбрать

$$C^2 = A^2 a^{4l+2} = [(2l-1)(2l+3)/2(2l+1)] a^{2l-1}.$$

б) Уравнение (IV.2) для $U = -\alpha/r^4$ при $E = 0$ заменой переменной $x = 1/r$ приводится к виду

$$(d^2/dx^2 + \bar{\alpha} - l(l+1)/x^2) R = 0, \quad \bar{\alpha} = 2ma/\hbar^2. \quad (1)$$

Его решение $R = \sqrt{x} J_{l+1/2}(\sqrt{\bar{\alpha}} x)$, или $R = J_{l+1/2}(\sqrt{\bar{\alpha}}/r) \sqrt{r}$, дает для $r > a$ радиальную в. ф. в момент появления уровня; при этом условие $R(a) = 0$ приводит к соотношению $\sqrt{\bar{\alpha}}/a = x_{l+1/2, N}$, определяющему условие существования такого уровня, здесь $x_{l+1/2, N}$ — N -й нуль функции Бесселя $J_{l+1/2}(x)$, не считая $x = 0$.

4.27. Запишем у. Ш. (IV.5) в потенциале $U_0(r)$ при $E = 0$ и в потенциале $U_0 + \delta U$ при энергии $\delta E_0 = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$:

$$-\chi_0'' + \tilde{U}_0(r) \chi_0 = 0, \quad -\chi'' + (\tilde{U}_0(r) + \delta \tilde{U}(r) + \kappa^2) \chi = 0 \quad (1)$$

($\tilde{U} \equiv 2mU/\hbar^2$). Умножив первое из них на $\chi(r)$, а второе — на $\chi_0(r)$ и почленно вычтя, получаем

$$\frac{d}{dr} (\chi_0 \chi' - \chi_0' \chi) = (\delta \tilde{U}(r) + \kappa^2) \chi \chi_0. \quad (2)$$

Проинтегрируем теперь (2) по r в пределах от $r=0$ до $r=a$, где a — радиус потенциалов $U_0(r)$ и $\delta U(r)$. Учитывая, что 1) $\chi_0(0) = \chi(0) = 0$; 2) $\chi_0(a) = 1$ и $\chi_0'(a) = 0$; 3) $\chi(r) \approx \chi_0(r)$ при $r \leq a$ (это условие фактически определяет нормировку в. ф. $\chi(r)$, нормировка же функции $\chi_0(r)$ определяется ее асимптотикой: $\chi_0(r) = 1$ при $r > a$), при этом $\chi(a) \approx e^{-\kappa a} \approx 1$ и $\chi'(a) \approx -\kappa e^{-\kappa a} \approx -\kappa$, в результате интегрирования получаем

$$-\kappa = \int_0^a \chi(r) \chi_0(r) \delta \tilde{U}(r) dr + \kappa^2 \int_0^a \chi(r) \chi_0(r) dr. \quad (3)$$

В первом из интегралов в (3) можно положить $\chi \approx \chi_0$ и затем устремить $a \rightarrow \infty$. Второе же слагаемое справа, $\approx \kappa^2$, можно опустить (оно мало по сравнению с κ в левой части). Таким образом находим

$$\kappa \approx \int_0^{\infty} (-\delta \tilde{U}) \chi_0^2(r) dr,$$

а с ним и выражение для сдвига уровня, приведенное в условии задачи. Для δ -потенциала уровень с $E = 0$ возникает при значении $\alpha = \alpha_0$ таком, что $m\alpha_0 a / \hbar^2 = 1/2$, см., например, 4.26. При этом в. ф. в момент возникновения уровня имеет вид: $\chi_0 = 1$ при $r > a$ и $\chi_0 = r/a$ при $r < a$, а $\delta U = -(\alpha - \alpha_0)\delta(r - a)$. Соответственно сдвиг уровня при малом $\alpha - \alpha_0 > 0$ равен

$$\delta E_0 \approx - \frac{2m}{\hbar^2} \left[\int_0^\infty \delta U \chi_0^2 dr \right]^2 = - \frac{2m}{\hbar^2} (\alpha - \alpha_0)^2,$$

что совпадает с результатом точного решения, см. 4.8а).

В заключение приведем еще один вывод формулы для сдвига уровня, основанный на соотношении (I.6). Для этого запишем потенциал в виде $U(r) = U_0(r) + \lambda \delta U(r)$, где $\lambda \geq 0$. При этом энергия уровня $\delta E_0(\lambda) \equiv -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$ также зависит от λ , причем $\delta E_0(\lambda = 0) = 0$. Согласно (I.6) имеем

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \delta E_0(\lambda) = \int_0^\infty \delta U(r) \chi_0^2(r, \lambda) dr, \quad (4)$$

где $\chi_0(r; \lambda)$ — нормированная на единицу в. ф. Эта функция просто связана с $\chi_0(r)$:

$$\chi_0(r; \lambda) \approx C(\kappa) e^{-\kappa r} \chi_0(r).$$

Действительно, при $r \leq a$ функция $\chi_0(r, \lambda)$ лишь множителем отличается от $\chi_0(r)$ (при этом $e^{-\kappa r} \approx 1$), а при $r > 0$ имеем $\chi_0(r; \lambda) = C(\kappa) e^{-\kappa r}$ (при этом $\chi_0(r) = 1$). Для нормировки в. ф. $\chi_0(r; \lambda)$ следует выбрать $C^2(\kappa) \approx 2\kappa$ (доминирующую роль в нормировочном интеграле играет область $r \sim 1/\kappa \gg a$, в которой $\chi_0(r, \lambda) = C(\kappa) e^{-\kappa r}$). С учетом сказанного (4) принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \delta E_0(\lambda) \equiv - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \frac{\partial \kappa}{\partial \lambda} \approx 2\kappa \int_0^\infty \delta U(r) \chi_0^2(r) dr.$$

Интегрируя это соотношение ($\kappa(\lambda = 0) = 0$), находим

$$\kappa(\lambda) = - \frac{2m}{\hbar^2} \lambda \int_0^\infty \delta U(r) \chi_0^2(r) dr.$$

Отсюда при $\lambda = 1$ и следует выражение для сдвига уровня.

4.28. Задача решается аналогично предыдущей. Хотя теперь уравнения (1) этой задачи изменяются за счет членов с центробежной энергией, соотношение (2) сохраняется и при $l \neq 0$.

Пронтегрировав это соотношение по r в пределах от 0 до ∞ , получаем

$$\int_0^{\infty} \chi_l(r) \chi_l^{(0)}(r) \delta \tilde{U}(r) dr + \kappa^2 \int_0^{\infty} \chi_l(r) \chi_l^{(0)}(r) dr = 0. \quad (1)$$

В существенной при интегрировании в (1) области $r \sim a$ имеем $\chi_l \approx \chi_l^{(0)}$ (при $l=0$ во втором интеграле такая замена не оправдана из-за возникающей расходимости). При этом, имея в виду нормировку $\int \chi_l^{(0)2} dr = 1$ для в. ф. $\chi_l^{(0)}$, сразу находим значение κ^2 , воспроизводящее приведенное в условии задачи выражение для сдвига уровня.

Отметим, что различие законов углубления уровней под влиянием возмущения: $\delta E \propto \delta U$ при $l \neq 0$ и $\delta E \propto -(\delta U)^2$ при $l=0$ отражают то обстоятельство, что при $l \neq 0$ состояние с $E=0$ является истинно связанным состоянием и ему отвечает нормируемая на 1 в. ф.; в случае же $l=0$ это не так — в. ф. ненормируема. Физическая причина такого различия связана с наличием центробежного барьера, препятствующего «уходу» частицы на бесконечность.

Для δ -потенциала в момент возникновения единственного уровня (с данным l) имеем $2m\alpha_0 a / \hbar^2 = (2l+1)$, см. 4.26; там же приведена нормированная в. ф. в момент возникновения уровня. При этом $\delta U = -(\alpha - \alpha_0) \delta(r-a)$ и энергия уровня при малом $(\alpha - \alpha_0) > 0$ оказывается равной

$$\delta E_l \approx \int_0^{\infty} \delta U (\chi_l^{(0)})^2 dr = - \frac{(2l-1)(2l+3)}{2(2l+1)} \frac{(\alpha - \alpha_0)}{a}, \quad l \neq 0,$$

что совпадает с результатом точного решения, см. 4.9а).

В заключение отметим, что при $l \neq 0$ выражение для сдвига уровня имеет вид формулы теории возмущений 1-го порядка по взаимодействию $\delta U(r)$, см. (VIII. 1). Отметим также еще один простой вывод выражения для сдвига уровня, основанный на использовании соотношения (4) из предыдущей задачи. Так как при $l \neq 0$ в. ф. $\chi_l^{(0)}(r)$ нормирована на 1, то в области $r \leq a$, вносящей основной вклад в значение интеграла в указанном соотношении, можно положить $\chi_l(r; \lambda) \approx \chi_l^{(0)}(r)$ (сравнить с $l=0$, когда функции $\chi_0(r; \lambda)$ и $\chi_0(r)$ имеют различную нормировку!). При этом соотношение (4) из 4.27 сразу приводит к выражению для сдвига уровня.

4.29. Под влиянием п. н. р. происходит сдвиг лишь s -уровней. Нормированная радиальная в. ф. невозмущенного состояния

при малых r имеет вид $R_n^{(0)}(r) \approx R_n^{(0)}(0)$. Обозначим через L расстояние, на котором еще можно считать функцию $R_n^{(0)}(r)$ постоянной (значение L зависит от конкретного вида $U(r)$ и энергии уровня $E_n^{(0)}$). При наличии п. н. р. радиальная функция согласно 4.10 при малых r ведет себя следующим образом²⁾:

$$R_n(r) \approx R_n^{(0)}(0) [-1/\alpha_0 r + 1 + \dots] \quad (1)$$

и сильно отличается от $R_n^{(0)}(r)$ при $r \rightarrow 0$ за счет члена $\propto 1/r$.

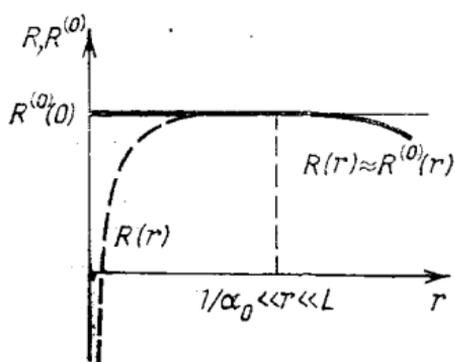


Рис. 32

Однако если $|\alpha_0 L| \gg 1$, то при $r \sim L$ функция $R_n(r)$ уже мало отличается от $R_n^{(0)}(r)$ (рис. 32). Это означает, что в такой ситуации сдвиг уровня под влиянием п. н. р. мал³⁾, а в. ф. R_n и $R_n^{(0)}$ мало отличаются друг от друга при всех $r \geq L$ (именно эта область вносит доминирующий вклад в нормировочный интеграл).

Для нахождения сдвига уровня поступим следующим образом. Напишем два у. Ш. (IV.5):

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \chi_n^{(0)''} + (E_n^{(0)} - U(r)) \chi_n^{(0)} &= 0, \\ \frac{\hbar^2}{2m} \chi_n'' + (E_n^{(0)} + \Delta E_n - U(r)) \chi_n &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

²⁾ Предполагается, что $rU(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$. Для более сингулярных потенциалов асимптотика (1) модифицируется (сравнить с 4.19) и граничное условие из 4.10, определяющее п. н. р., уже не может быть реализовано. В частности, оказывается несостоятельным моделирование потенциалом нулевого радиуса сильного короткодействующего потенциала при существовании на малых расстояниях кулоновского взаимодействия (хотя формула теории возмущений по длине рассеяния остается справедливой).

³⁾ Заметим, что график на рис. 32 отвечает значению $\alpha_0 > 0$, когда в п. н. р. имеется уровень д. с. с энергией $E_S^{(0)} = -\hbar^2 \alpha_0^2 / 2m$, причем $|E_S^{(0)}| \gg |E_n^{(0)}| \sim \hbar^2 / mL^2$. При нарушении условия $\alpha_0 L \gg 1$ энергия уровня в п. н. р. такого же порядка величины, как и у уровней $E_n^{(0)}$ в потенциале $U(r)$. Однако в этом случае сдвиги уровней велики: сравнимы с расстоянием между ними, так что возникает *перестройка спектра* (см. 4.11 и 9.3); формула (4) при этом неприменима.

($\chi = rR$). Хотя эти уравнения одинаковы по виду, они отличаются характером граничного условия при $r \rightarrow 0$: в отсутствие п. н. р. $\chi_n^{(0)} \approx R_n^{(0)} r \propto r$, а при его наличии $\chi_n \approx R_n r \approx \text{const}$, где $R_n(r)$ определяется (1). Умножая первое из уравнений (2) на χ_n , а второе — на $\chi_n^{(0)}$, почленно вычитая и интегрируя по r в пределах от $r = 0$ до $r = \infty$, получаем

$$\frac{\hbar^2}{2m} [\chi_n^{(0)'} \chi_n - \chi_n^{(0)} \chi_n'] \Big|_0^\infty = \Delta E_n \int_0^\infty \chi_n^{(0)}(r) \chi_n(r) dr. \quad (3)$$

Левая часть здесь равна $\hbar^2 R_n^{(0)2}(0)/2m\alpha_0$. В правой части можно заменить $\chi_n(r)$ на $\chi_n^{(0)}(r)$ (такая замена не оправдана при малых r , но эта область не вносит существенного вклада в значение интеграла), так что интеграл приближенно равен единице. Таким образом, из (3) следует искомое выражение для сдвига уровня:

$$\Delta E_n \approx \frac{\hbar^2 R_n^{(0)2}(0)}{2m\alpha_0} \equiv 2\pi \frac{\hbar^2}{m} (\Psi_n^{(0)}(0))^2 a_0. \quad (4)$$

Здесь $a_0 \equiv 1/\alpha_0$ — длина рассеяния на п. н. р. (см. 13.20).

Отметим, что приближение (4) для сдвига уровня называют формулой теории возмущений по длине рассеяния. Эта формула применима и в случае нецентральных потенциалов $U(r)$, см. 4.31, а также 8.61.

Рассмотрим применение формулы (4) в условиях задачи 4.11. При этом

$$R_n^{(0)} = \sqrt{2/a} (\sin \kappa_n^{(0)} r) / r \underset{r \rightarrow 0}{\approx} \sqrt{2/a} \kappa_n^{(0)},$$

где $\kappa_n^{(0)} = \pi(n_r + 1)/a$ (не путать радиус ямы a с длиной рассеяния $a_0!$) и

$$\Delta E_n \approx \hbar^2 \kappa_n^{(0)2} / m\alpha_0 = 2E_n^{(0)} / \alpha_0 a,$$

что при $\kappa_n^{(0)} \ll |\alpha_0|$ совпадает с результатом точного решения. Последнее неравенство, как нетрудно заметить, соответствует условию применимости $|\alpha_0 L| \gg 1$ формулы (4).

4.30. Применимость формулы (4) предыдущей задачи предполагает, что сдвиг уровня мал по сравнению с энергией связи частицы. Однако если невозмущенное состояние имеет аномально малую энергию, то она допускает простое обобщение и на случай, когда сдвиг сравним с энергией связи. Это обобщение может быть получено непосредственно из формулы (3) из 4.29, если учесть следующие обстоятельства.

Во-первых, в. ф. невозмущенного состояния в поле $U(r)$ с малой энергией связи просто связана с в. ф. $\tilde{R}_n^{(0)}(r)$ в момент появления уровня (при $E = 0$, сравнить с 4.27):

$$R_n^{(0)} \approx \sqrt{2\kappa_n^{(0)}} \tilde{R}_n^{(0)}(r) e^{-\kappa_n^{(0)}r}, \quad \kappa_n^{(0)} = \sqrt{-2mE_n^{(0)}/\hbar^2}. \quad (1)$$

Во-вторых, совершенно аналогично, в. ф. состояния, возмущенного п. н. р., при $r \geq L$ имеет вид

$$R_n \approx \sqrt{2\kappa_n} \tilde{R}_n^{(0)}(r) e^{-\kappa_n r}, \quad \kappa_n = \sqrt{-2mE_n/\hbar^2} \quad (2)$$

(в. ф. (1) и (2) нормированы на единицу). С учетом (1) и (2) из выражения (3) предыдущей задачи находим ($\chi = rR$)

$$\frac{E_n - E_n^{(0)}}{\kappa_n^{(0)} + \kappa_n} = \frac{\hbar^2}{2m\alpha_0} (\tilde{R}_n^{(0)}(0))^2 \quad (3)$$

(при вычислении интеграла следует учесть, что его значение определяется, в основном, областью больших r , где подынтегральная функция $\propto \exp(-(\kappa_n + \kappa_n^{(0)})r)$). Отсюда и следует приведенное в условии выражение для энергии уровня; при этом $\kappa_n = \kappa_n^{(0)} - \tilde{R}_n^{(0)2}(0)/\alpha_0$.

При $\kappa_n^{(0)} \gg |\tilde{R}_n^{(0)2}(0)/\alpha_0|$ сдвиг уровня мал и полученный результат переходит в 4.29. Отметим в заключение, что рассматриваемое состояние является истинно связанным лишь при $\kappa_n > 0$, в противном случае уровень является *виртуальным*⁴⁾.

4.31. Имея в виду уравнение для функции Грина, ее убывание при $r \rightarrow \infty$ и поведение $\propto 1/r$ при $r \rightarrow 0$, замечаем, что в. ф. связанного состояния в потенциале $U(r)$ при наличии п. н. р. имеет вид

$$\Psi_n(r, E_n) = C_n G_0(r, 0; E_n) = C_n \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left[\frac{1}{r} + A(E_n) + \dots \right], \quad (1)$$

C_n — нормировочный коэффициент (при этом существенно ограничение $rU(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$ на потенциал; иначе указанное разложение не справедливо, сравнить с 4.19, и переход к приближению п. н. р. невозможен). Сравнив разложение (1) с выражением, определяющим п. н. р., см. 4.10, получаем уравнение для спектра уровней

$$A(E_n) = -\alpha_0, \quad (2)$$

которое эквивалентно приведенному в условии задачи.

⁴⁾ Заметим, что в зависимости от величины и знака α_0 , под влиянием п. н. р. виртуальный уровень в потенциале $U(r)$ может стать реальным или, наоборот, реальный уровень может превратиться в виртуальный.

В случае большого значения α_0 (в пределе $\alpha_0 \rightarrow \infty$) корни уравнения (2) близки к значениям $E_n^{(0)}$, являющимся полюсами функции Грина и отвечающим спектру в изолированном потенциале $U(r)$. Имея в виду выражение для функции Грина

$$G_0(r, r', E) = \sum_m \frac{\Psi_m^{(0)}(r) \Psi_m^{(0)*}(r')}{E_m^{(0)} - E}, \quad (3)$$

замечаем, что при $r' = 0$, $r \rightarrow 0$ и $E \rightarrow E_n^{(0)}$

$$G_0(r, 0; E_n) \approx \frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot \frac{1}{r} + \frac{|\Psi_n^{(0)}(0)|^2}{E_n^{(0)} - E_n}. \quad (4)$$

Отсюда $A(E_n) \approx 2\pi\hbar^2 |\Psi_n^{(0)}(0)|^2 / m (E_n^{(0)} - E_n)$, и из (2) следует приведенное в условии выражение для сдвига уровня $\Delta E_n = E_n - E_n^{(0)}$.

4.32. Указанная в.ф. удовлетворяет уравнению $\chi_0'' - (2m/\hbar^2) \tilde{U} \chi_0 = 0$ с потенциалом

$$\tilde{U}(r) = U(r) - \frac{\hbar U'(r)}{2\sqrt{-2mU(r)}} \operatorname{tg} \left(\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty \sqrt{-2mU} dr \right) \quad (1)$$

и отвечает условию появления связанного состояния в таком потенциале в случае⁵⁾

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^\infty \sqrt{-2mU(r)} dr = \frac{\pi}{2}. \quad (2)$$

При этом, записав $U(r) = \mathcal{U}(r) + \delta U(r)$, замечаем, что $\delta U(r) \geq 0$, так что потенциальная яма $U(r)$ мельче, чем $\mathcal{U}(r)$. Отсюда и следует утверждение задачи.

Для прямоугольной потенциальной ямы глубины U_0 и ширины a рассматриваемое необходимое условие принимает вид $U_0 \geq \hbar^2 \pi^2 / 8ma^2$, что совпадает с точным условием существования связанных состояний. Для экспоненциальной ямы, $U = -U_0 e^{-r/a}$, получаем $ma^2 U_0 / \hbar^2 \geq \pi^2 / 32 \approx 0,31$, сравнить с 4.21.

4.33. У.Ш. в двумерном случае для состояний с $m = 0$ и энергией $E_{n,0}$ имеет вид (μ — масса частицы)

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E_{n,0} - U(\rho)) \right] \Psi_{n,0}(\rho) = 0. \quad (1)$$

⁵⁾ Это соотношение обеспечивает выполнение граничного условия $\chi_0(0) = 0$; об условии на бесконечности см. 4.25.

а) Решение уравнения (1) для δ -потенциала при $E_{n\rho 0} = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m < 0$, ограниченное в нуле и равное нулю на бесконечности, имеет вид: $\Psi(\rho) = c_1 I_0(\kappa\rho)$ при $\rho < a$ и $\Psi = c_2 K_0(\kappa\rho)$ при $\rho > a$ (K_0 — функция Макдональда). Условия сшивания решения в точке $\rho = a$, такие же как и в 2.6, приводят к соотношению

$$x [K_0'(x) I_0(x) - K_0(x) I_0'(x)] = -(2\mu a / \hbar^2) K_0(x) I_0(x), \quad (2)$$

$x = \kappa a$, определяющему спектр. Используя значение вронскиана $\mathcal{W}(I_0(x), K_0(x)) = -1/x$, запишем (2) в виде

$$K_0(\kappa a) I_0(\kappa a) = 1/\xi, \quad \xi \equiv 2\mu a / \hbar^2. \quad (3)$$

Рассмотрим сначала случай, когда уровень имеет малую энергию ($\kappa a \ll 1$). Используя асимптотики $I_0(z) \approx 1 + z^2/4$ и $K_0(z) \approx \ln(2/\gamma z)$ при $z \rightarrow 0$, имеем⁶⁾ из (3)

$$\ln(2/\kappa\gamma a) \approx 1/\xi, \quad \text{или} \quad E_{00} \approx -(2\hbar^2/\mu\gamma^2 a^2) e^{-2/\xi}, \quad (4)$$

причем $\xi \ll 1$, т. е. уровень с малой энергией связи может быть только в случае мелкой ямы. Это означает, что в δ -яме имеется только один уровень (с $m = 0$), как и в одномерном случае. С увеличением a уровень понижается и при $\xi \gg 1$ его энергия $E_{00} \approx -\mu a^2 / 2\hbar^2$, что легко получить из (3), если воспользоваться асимптотиками $K_0(z)$ и $I_0(z)$ при $z \rightarrow \infty$.

б) Решение уравнения (1) для прямоугольной потенциальной ямы имеет вид

$$\Psi_{n\rho 0}(\rho) = \begin{cases} c_1 J_0(k\rho), & \rho < a, \quad k = \sqrt{2\mu(U_0 - |E_{n\rho 0}|)/\hbar^2}, \\ \dots, & \rho > a, \quad \kappa = \sqrt{-2\mu E_{n\rho 0}/\hbar^2}. \end{cases} \quad (5)$$

Из непрерывности $\Psi_{n\rho 0}$ и $\Psi'_{n\rho 0}$ при $\rho = a$ следует

$$\kappa J_0(\kappa a) K_0'(\kappa a) = k J_0'(ka) K_0(\kappa a), \quad (6)$$

что является уравнением для спектра уровней с $m = 0$.

В случае мелкой ямы, $\xi = \mu a^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$, аргументы цилиндрических функций в (6) малы. Так как

$$J_0(x) \approx 1, \quad J_0'(x) \approx -x/2, \quad K_0(x) \approx \ln(2/\gamma x), \quad K_0'(x) \approx -1/x$$

при $x \ll 1$, то уравнение (6) принимает вид

$$\mu(U_0 - |E_{n\rho 0}|) a^2 \hbar^{-2} \ln \sqrt{2\hbar^2/\mu\gamma^2 a^2 |E_{n\rho 0}|} \approx 1. \quad (7)$$

⁶⁾ Здесь $\gamma = 1,781\dots$ — постоянная Эйлера.

Это уравнение имеет только один корень

$$E_{00} \approx -\frac{2\hbar^2}{\mu\gamma^2 a^2} \exp\left(-\frac{2\hbar^2}{\mu a^2 U_0}\right) = -\frac{2U_0}{\gamma^2 \xi} \exp(-2/\xi), \quad (8)$$

который легко найти, если заметить, что из (7) следует $|E_{n_\rho 0}| \ll U_0$, и пренебречь $|E_{n_\rho 0}|$ по сравнению с U_0 .

Таким образом, в мелкой двумерной яме, как и в (симметричной) одномерной, всегда имеется одно связанное состояние. Однако теперь глубина залегания уровня, как видно из (4) и (8), мала по сравнению с глубиной ямы уже экспоненциально.

4.34. У. Ш. принимает вид $(\Psi_{n_\rho m} = R_{n_\rho |m|} e^{im\phi} / \sqrt{2\pi})$

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E_{n_\rho |m|} - U(\rho)) \right] R_{n_\rho |m|}(\rho) = 0. \quad (1)$$

а) В случае $U = -\alpha/\rho$ уравнение (1) имеет такой же вид, как и уравнение (IV.6), отличаясь от последнего лишь заменой $l + 1/2$ на $|m|$. Соответственно, используя известное выражение для уровней энергии в кулоновском трехмерном потенциале и заменяя в нем $l + 1/2$ на $|m|$, находим

$$E_{n_\rho |m|} = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2 (n_\rho + |m| + 1/2)^2}. \quad (2)$$

Отсюда видно, что в двумерном поле $U = -\alpha/\rho$, как и в трехмерном $U = -\alpha/r$, имеет место случайное вырождение, так как энергия зависит только от комбинации $n_\rho + |m|$ квантовых чисел n_ρ и m . Если ввести квантовое число $N = n_\rho + |m| + 1$ (аналог главного квантового числа n в кулоновском поле), то выражение (2) можно записать в виде

$$E_N = -\mu\alpha^2/2\hbar^2 (N - 1/2)^2; \quad N = 1, 2, \dots \quad (3)$$

Этот уровень имеет кратность вырождения $g(N) = 2N - 1$.

б) Решение уравнения (1) в случае бесконечно глубокой потенциальной ямы при $\rho < a$, ограниченное в нуле, имеет вид

$$R_{n_\rho |m|} = c J_{|m|}(\kappa\rho), \quad \text{где} \quad \kappa = \sqrt{2\mu E_{n_\rho |m|} / \hbar^2}.$$

При этом условие обращения в. ф. в нуль на стенке ямы определяет спектр

$$E_{n_\rho |m|} = \hbar^2 \alpha_{n_\rho + 1, |m|}^2 / 2\mu a^2, \quad (4)$$

где $\alpha_{km} > 0$ — k -й нуль функции Бесселя $J_m(\alpha)$ (в порядке возрастания α_{km}). В частности, учитывая значения $\alpha_{10} \approx 2,40$ и

$\alpha_{11} \approx 3,83$, находим энергии основного уровня $E_{00} \approx 2,88\hbar^2/\mu a^2$ (для него $m = 0$) и $E_{01} \approx 7,33\hbar^2/\mu a^2$ — самого нижнего уровня с $|m| = 1$. Отметим, наконец, что уровни, отвечающие $m = 0$, являются невырожденными, а для $|m| \neq 0$ — двукратно вырожденными.

4.35. Функция Грина удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} (\Delta - \kappa^2) G_E(\rho, \rho') = \delta(\rho - \rho') \quad (1)$$

($\kappa = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2} > 0$). Из соображений симметрии представляется очевидным, что она является функцией вида $G_E(\rho, \rho') = f(|\rho - \rho'|)$. При этом уравнение (1) при $\rho \neq \rho'$ и его решение имеют вид

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \kappa^2 \right) f(\rho) = 0, \quad f(\rho) = c K_0(\kappa\rho), \quad (2)$$

где $K_0(z)$ — функция Макдональда (второе независимое решение, $\infty I_0(\kappa\rho)$, экспоненциально растет при $\rho \rightarrow \infty$).

Для определения c проинтегрируем обе части уравнения (1) по кругу малого радиуса ε с центром в точке $\rho = \rho'$. При этом в правой части получаем единицу. Интегрирование второго слагаемого в левой части (с κ^2) дает нуль при $\varepsilon \rightarrow 0$. Интеграл же от первого слагаемого преобразуем с помощью теоремы Остроградского — Гаусса:

$$\int \Delta G_E dV = \oint \nabla G_E dS.$$

В двумерном случае $dV \equiv dS$, $dS \equiv dl = n dl$ ⁷⁾. Так как при $x \rightarrow 0$ имеем $K_0(x) \approx \ln 2/\gamma x$, то $\nabla K_0(\kappa\rho) \approx -\rho/\rho^2$ при $\rho \rightarrow 0$ и в результате интегрирования получаем $\pi\hbar^2 c/\mu = 1$, так что окончательное выражение для G_E имеет вид

$$G_E(\rho, \rho') = \mu K_0(\kappa |\rho - \rho'|) / \pi\hbar^2. \quad (3)$$

4.36. Рассмотрение, аналогичное проведенному в предыдущей задаче, приводит к следующему виду функций Грина:

$$G_E^{(\pm)}(\rho, \rho') = \pm i\mu H_0^{(1,2)}(k |\rho - \rho'|) / 2\hbar^2, \quad (1)$$

где $k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2} > 0$, а $H_0^{(1,2)}(z)$ — функции Ганкеля.

⁷⁾ Обращаем внимание на то, что орт \mathbf{n} (орт «внешней нормали») перпендикулярен контуру интегрирования. В данной задаче

$$d\mathbf{l} = \mathbf{n} dl = \frac{\tilde{\rho}}{\rho} \tilde{\rho} d\varphi = \tilde{\rho} d\varphi \quad (\tilde{\rho} = |\rho - \rho'| = \varepsilon).$$

4.37. Функция Грина удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \left(\frac{d^2}{d\varphi^2} + \kappa^2 \right) G_E(\varphi, \varphi') = \delta(\varphi - \varphi'), \quad (1)$$

здесь $\kappa = \sqrt{2IE/\hbar^2}$. Из соображений симметрии очевидно, что G_E является функцией вида $G_E = G_E(|\varphi - \varphi'|)$. При этом из уравнения (1) при $\varphi \neq \varphi'$ следует

$$G_E = C \cos[\kappa|\varphi - \varphi'| + \alpha].$$

Значение $C = I/\kappa\hbar^2 \sin \alpha$ вытекает из условия сшивания функции G_E в точке $\varphi = \varphi'$ (сравнить с 2.6), а величина α находится из условия равенства функции Грина и ее производной по φ в точках $\varphi - \varphi' = \pm\pi$, соответствующих одной и той же точке пространства, и равна $\alpha = -\kappa\pi$.

Таким образом, функция Грина имеет вид

$$G_E(\varphi, \varphi') = -I \cos[\kappa|\varphi - \varphi'| - \kappa\pi]/\kappa\hbar^2 \sin \kappa\pi. \quad (2)$$

Она имеет полюсы в точках $\kappa = \pm m$ (m — целые числа, $m = 0, 1, 2, \dots$), т. е. в точках $E_m = \hbar^2 m^2 / 2I$ плоскости комплексной переменной E . При этом, как и следовало ожидать, положения полюсов совпадают со значениями энергетических уровней ротатора.

4.38. Функция Грина является решением уравнения

$$(\hat{H} - E) G_E \equiv \left(\frac{\hbar^2}{2I} \hat{l}^2 - E \right) G_E = \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}'). \quad (1)$$

Из соображений симметрии представляется очевидным, что G_E является функцией вида $G_E \equiv G_E(\mathbf{n}\mathbf{n}')$, т. е. зависит только от угла между векторами \mathbf{n} и \mathbf{n}' . Соответственно, выбрав направление полярной оси \mathbf{n}_0 вдоль \mathbf{n}' и введя обозначения $z = \mathbf{n}\mathbf{n}_0 = \cos \theta$ и $E \equiv \hbar^2 \nu(\nu + 1) / 2I$, перепишем уравнение (1) в виде

$$(1 - z^2) G_E''(z) - 2z G_E'(z) + \nu(\nu + 1) G_E(z) = -\frac{2I}{\hbar^2} \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}_0). \quad (2)$$

При $\theta \neq 0$ (т. е. при $z \neq 1$) правая часть (2) равна нулю; решение такого уравнения, как известно [33], можно представить в виде

$$G_E(z) = c_1 \mathcal{P}_\nu(-z) + c_2 \mathcal{P}_\nu(z), \quad (3)$$

где $\mathcal{P}_\nu(z)$ — сферическая функция Лежандра 1-го рода. Так как $\mathcal{P}_\nu(1) = 1$, а $\mathcal{P}_\nu(z) \rightarrow \infty$ при $z \rightarrow -1$, то в (3) следует положить $c_2 = 0$; значение же c_1 определяется δ -функциональным слагаемым в (2). Для определения c_1 рассмотрим предел $z \rightarrow 1$,

положив $z \approx 1 - \theta^2/2$. Уравнение (2) при этом принимает вид

$$\left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{1}{\theta} \frac{d}{d\theta} + \nu(\nu + 1) \right] G_E = -\frac{2I}{\hbar^2} \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}_0), \quad (4)$$

совершенно аналогичный уравнению для функции Грина свободной частицы в двумерном случае⁸⁾ (см. 4.35). Так как⁹⁾

$$\mathcal{P}_\nu(-z) \approx (2/\pi) \sin(\pi\nu) \ln \theta \quad \text{при } z = 1 - \theta^2/2 \rightarrow 1,$$

то, имея в виду результат задачи 4.35, находим значение $c_1 = -I/2\hbar^2 \sin \pi\nu$ и окончательный вид функции Грина

$$G_E = -\frac{I}{2\hbar^2 \sin \pi\nu} \mathcal{P}_\nu(-\mathbf{nn}'). \quad (5)$$

Нахождение функции Грина по общему методу сводится в данной задаче к вычислению суммы

$$G_E(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \sum_{l, m} \frac{Y_{lm}(\mathbf{n}) Y_{lm}^*(\mathbf{n}')}{E_l - E}, \quad (6)$$

где $E_l = \hbar^2 l(l+1)/2I$ — уровни энергии ротатора, Y_{lm} — соответствующие с.ф. гамильтониана. Воспользовавшись теоремой сложения для шаровых функций (см. (III.6)), выражение (6) можно преобразовать к виду

$$G_E = \frac{I}{2\pi\hbar^2} \sum_l \frac{(2l+1) P_l(\mathbf{nn}')}{l(l+1) - \nu(\nu+1)}. \quad (7)$$

Используя также соотношение (см. [33, с. 1033])

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\nu-l} - \frac{1}{\nu+l+1} \right) P_l(z) = \frac{\pi}{\sin \pi\nu} \mathcal{P}_\nu(-z), \quad (8)$$

замечаем, что выражение (6) совпадает с (5).

⁸⁾ Такая аналогия не случайна, так как оператор $-\hat{L}^2$ является лапласианом на сфере, а малая часть сферы совпадает с касательной плоскостью. При этом вектор $\mathbf{n} - \mathbf{n}_0$ приближенно перпендикулярен \mathbf{n}_0 и $|\mathbf{n} - \mathbf{n}_0| \approx \theta$ является аналогом переменной ρ .

⁹⁾ Этот результат легко получить из известного соотношения [33]

$$\mathcal{P}_\nu(\cos \theta) = \frac{2}{\pi} \int_0^\theta \frac{\cos(\nu + 1/2)\beta}{\sqrt{2(\cos \beta - \cos \theta)}} d\beta,$$

замечая, что при $\theta \rightarrow \pi$ интеграл расходится на верхнем пределе, и вычисляя его расходящуюся часть.

5.1. С. ф. $\Psi_{s_x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ и с. з. s_x оператора $\hat{s}_x = \hat{\sigma}_x/2$ находятся из решения уравнения $\hat{s}_x \Psi_{s_x} = s_x \Psi_{s_x}$:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

или $b = 2s_x a$, $a = 2s_x b$. Нетривиальное решение этой системы уравнений существует при условии $4s_x^2 = 1$, определяющем возможные значения (спектр) величины $s_x = \pm 1/2$. При этом $a = b$ для $s_x = 1/2$ и $a = -b$ для $s_x = -1/2$. Нормированные на единицу, так что $\langle \Psi_{s_x} | \Psi_{s_x} \rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1$, с. ф. Ψ_{s_x} имеют вид

$$\Psi_{s_x=+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{s_x=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Аналогично находим

$$\Psi_{s_y=+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad \Psi_{s_y=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{s_z=+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{s_z=-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

5.2. Оператор спина $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$ является оператором векторной (точнее, псевдовекторной) величины и поэтому оператор проекции его \hat{s}_n на произвольное направление \mathbf{n} ($n^2 = 1$) должен выражаться через операторы компонент \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z так же, как и в случае обычного (неоператорного) вектора, т. е.

$$\hat{s}_n = \mathbf{n} \hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \mathbf{n} \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{2} (\sin \theta \cos \varphi \cdot \hat{\sigma}_x + \sin \theta \sin \varphi \cdot \hat{\sigma}_y + \cos \theta \cdot \hat{\sigma}_z),$$

где θ , φ — полярный и азимутальный углы направления \mathbf{n} . Используя явный вид матриц Паули (V.2), имеем

$$\hat{s}_n = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

Значение \hat{s}_n в состоянии $\Psi_{s_z=1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ равно

$$\hat{s}_n = \langle \Psi | \hat{s}_n | \Psi \rangle = \frac{1}{2} (10) \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cos \theta.$$

Аналогично для состояния с $s_z = -1/2$ находим $\bar{s}_n = -(\cos \theta)/2$ (отметим, что соотношение $\bar{s}_n = s_z \cos \theta$ аналогично результату 3.11).

Обозначим $w(+)$ вероятность значения $s_n = +1/2$, при этом $w(-) = 1 - w(+)$ — вероятность значения $s_n = -1/2$. Учитывая, что $\bar{s}_n = s_z \cos \theta$, находим

$$\bar{s}_n = w(+)\cdot\frac{1}{2} + w(-)\cdot\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}[2w(+)-1] = s_z \cos \theta,$$

$$w(+)=\frac{1}{2}(1+2s_z \cos \theta), \quad w(-)=\frac{1}{2}(1-2s_z \cos \theta).$$

5.3. Найдем сначала с. ф. $\Psi_{s_n=1/2} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ оператора проекции спина на направление \mathbf{n} . Используя явный вид оператора \hat{s}_n , установленный в предыдущей задаче, из уравнения на с. ф.

$$\hat{s}_n \Psi_{s_n=1/2} = \frac{1}{2} \Psi_{s_n=1/2}$$

получаем соотношение $a \sin(\theta/2) = b e^{-i\varphi} \cos(\theta/2)$. Отсюда, выбрав $a = \cos(\theta/2)$, находим $b = e^{i\varphi} \sin(\theta/2)$, так что спиновая функция $\Psi_{s_n=1/2}$ принимает вид, указанный в условии задачи; при этом $\theta = 2\alpha$ и $\varphi = \beta$ определяют искомые полярный и азимутальный углы.

Выбрав $\theta = 2\alpha = \pi/2$ и $\varphi = \beta = 0$, находим с. ф. $\Psi_{s_x=1/2}$. При $\theta = \pi/2$ и $\varphi = \pi$ получаем с. ф. $\Psi_{s_x=-1/2}$ и т. д.; сравнить с результатами из 5.1.

5.4. Взяв шпур от обеих частей приведенного в условии соотношения между матрицами и воспользовавшись тем, что $\text{Sp } \hat{\sigma}_i = 0$, $\text{Sp } \hat{1} = 2$, находим

$$a_0 = (1/2) \text{Sp } \hat{A}.$$

Далее, умножив обе части указанного соотношения на матрицу $\hat{\sigma}_k$ справа, опять вычислим шпур. Используя при этом соотношение (V.3), находим

$$a_k = (1/2) \text{Sp } (\hat{A} \hat{\sigma}_k) = (1/2) \text{Sp } (\hat{\sigma}_k \hat{A}).$$

5.5. $(a\hat{\sigma})^n = a^n \hat{1}$, если n четное, и $(a\hat{\sigma})^n = a^{n-1} (a\hat{\sigma})$, если n нечетное.

5.6. 1) Оператор имеет всего два с. з., равные $f_{1,2} = a \pm b$. Соответствующие им с. ф. определяются результатом из 5.3, причем теперь $\mathbf{n} = \pm \mathbf{b}/b$.

2) Вид оператора $\hat{F} = F(\hat{f})$ следует из результата 1.22:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} [F(a+b) + F(a-b)] + \frac{1}{2b} [F(a+b) - F(a-b)] b\hat{\sigma}.$$

В частности: $\hat{R}(\varphi_0) = \cos(\varphi_0/2) + i \sin(\varphi_0/2) \cdot \left(\frac{\varphi_0}{\varphi_0} \hat{\sigma}\right)$. Чтобы спиновые функции $\Psi_{s_z = \pm 1/2}$ в результате вращения системы координат перешли в $\Psi_{s_n = \pm 1/2}$, вектор φ_0 следует выбрать равным $\varphi_0 = (\theta \sin \varphi, -\theta \cos \varphi, 0)$, см. 3.24, где θ, φ — полярный и азимутальный углы вектора n . При этом $R(\varphi_0) = \cos(\theta/2) + i \sin(\theta/2) (\sin \varphi \hat{\sigma}_x - \cos \varphi \hat{\sigma}_y)$, так что

$$\Psi_{s_n = +1/2} = \hat{R}(\varphi_0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}$$

в согласии с 5.3.

5.7. Из преобразования ($n_0 = \varphi_0/\varphi_0$)

$$\Psi' = \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix} = \exp\left(i\varphi_0 \frac{\hat{\sigma}}{2}\right) \Psi = \left(\cos \frac{\varphi_0}{2} + i \sin \frac{\varphi_0}{2} n_0 \hat{\sigma}\right) \Psi \quad (1)$$

следует закон преобразования комплексно сопряженной спиновой функции $\Phi^* = (\varphi_1^*, \varphi_2^*)$:

$$\Phi^{*\prime} = (\varphi_1^{*\prime}, \varphi_2^{*\prime}) = \Phi^* \left(\cos \frac{\varphi_0}{2} - i \sin \frac{\varphi_0}{2} n_0 \hat{\sigma}\right). \quad (2)$$

Отсюда сразу находим, что $\Phi^{*\prime} \Psi' = \Phi^* \Psi$.

Используя (1), (2) и соотношение (V.3), после простых преобразований находим

$$\mathbf{V}' = \Phi^{*\prime} \hat{\sigma} \Psi' = \cos \varphi_0 \cdot \mathbf{V} - \sin \varphi_0 \cdot [n_0 \mathbf{V}] + 2 \sin^2 \frac{\varphi_0}{2} \cdot n_0 (n_0 \mathbf{V}), \quad (3)$$

что представляет закон преобразования вектора при повороте системы координат на угол φ_0 . В частности, при $n_0 = (0, 0, 1)$ (поворот относительно оси z) из (3) следует $V'_z = V_z$ и

$$V'_x = \cos \varphi_0 \cdot V_x + \sin \varphi_0 \cdot V_y, \quad V'_y = -\sin \varphi_0 \cdot V_x + \cos \varphi_0 \cdot V_y.$$

5.8. Выражение $A_{\alpha\beta} B_{\gamma\delta}$ можно рассматривать как матрицу¹⁾ $M_{\alpha\delta}(\gamma, \beta)$, зависящую от β и γ как от параметров, и записать ее в виде

$$M_{\alpha\delta}(\gamma, \beta) = \sum_{i=0}^3 C_i(\gamma, \beta) (\hat{\sigma}_i)_{\alpha\delta}.$$

¹⁾ Т. е. положить $M_{\alpha\delta}(\gamma, \beta) \equiv A_{\alpha\beta} B_{\gamma\delta}$.

где значения $C_i(\gamma, \beta)$ определяются результатом 5.4. Точно так же можно разложить и $C_i(\gamma, \beta)$. Таким образом приходим к соотношениям

$$A_{\alpha\beta} B_{\gamma\delta} = \sum_{i, k=0}^3 C_{ik} (\hat{\sigma}_i)_{\alpha\delta} (\hat{\sigma}_k)_{\gamma\beta}, \quad (1)$$

$$C_{ik} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (\hat{\sigma}_i)_{\delta\alpha} (\hat{\sigma}_k)_{\beta\gamma} A_{\alpha\beta} B_{\gamma\delta}.$$

Используя (1), нетрудно получить²⁾

$$\begin{aligned} \langle \Psi^{(2)} | \Phi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \Psi^{(1)} \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \{ \langle \Psi^{(2)} | \Psi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \Phi^{(1)} \rangle + \langle \Psi^{(2)} | \hat{\sigma} | \Psi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \hat{\sigma} | \Phi^{(1)} \rangle \}, \\ \langle \Psi^{(2)} | \hat{\sigma} | \Phi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \hat{\sigma} | \Psi^{(1)} \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \{ 3 \langle \Psi^{(2)} | \Psi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \Phi^{(1)} \rangle - \langle \Psi^{(2)} | \hat{\sigma} | \Psi^{(1)} \rangle \langle \Phi^{(2)} | \hat{\sigma} | \Phi^{(1)} \rangle \} \end{aligned}$$

(обратить внимание на *скалярный* характер всех фигурирующих в этих соотношениях матричных элементов, см. в связи с этим 5.7).

5.9. Вид искоемых операторов непосредственно следует из результата 1.35:

$$\hat{P}_{s_z = \pm 1/2} = (1 \pm \hat{\sigma}_z)/2 \quad \text{и} \quad \hat{P}_{s_n = \pm 1/2} = (1 \pm \mathbf{n}\hat{\sigma})/2,$$

здесь $\mathbf{n}^2 = 1$. Подействовав оператором $\hat{P}_{s_n = 1/2}$ на произвольную спиновую функцию Ψ , получаем с. ф. оператора \hat{s}_n , отвечающую с. з. $s_n = 1/2$. Выбрав для простоты вычислений $\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, имеем

$$\Psi_{s_n = 1/2} = C \hat{P}_{s_n = 1/2} \Psi = \frac{C}{2} (1 + \mathbf{n}\hat{\sigma}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix},$$

здесь θ, φ — полярный и азимутальный углы направления \mathbf{n} , а значение $C = \cos^{-1}(\theta/2)$ выбрано для нормировки спиновой функции на 1; сравнить с 5.3.

5.10. Вид спиновых функций для $S = 1$ и $S_z = \pm 1$ очевиден:

$$\Psi_{11} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \quad \text{и} \quad \Psi_{1, -1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2.$$

²⁾ Подчеркнем, что здесь индексы 1 и 2 нумеруют различные спиноры, а не различные компоненты одной и той же спиновой функции!

Далее, спиновые функции с $S_z = 0$ имеют вид

$$\Psi_{S, S_z=0} = C_S^{(1)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + C_S^{(2)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2. \quad (1)$$

Из уравнения $\hat{S}^2 \Psi_{00} = 0$ следует, что $\hat{S}_x \Psi_{00} = 0$, т. е.

$$\begin{aligned} \hat{S}_x \Psi_{00} &= \frac{1}{2} [\hat{\sigma}_{x1} + \hat{\sigma}_{x2}] \left\{ C_0^{(1)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + C_0^{(2)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} = \\ &= (C_0^{(1)} + C_0^{(2)}) \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \right\} = 0. \end{aligned}$$

Отсюда $C_0^{(1)} = -C_0^{(2)}$, при этом из условия нормировки спиновой функции имеем $C_0^{(2)} = 1/\sqrt{2}$. Для определения $C_1^{(1,2)}$ в (1) при $S = 1$ удобно воспользоваться условием ортогональности с. ф. $\langle \Psi_{00} | \Psi_{10} \rangle = 0$, что дает $C_1^{(1)} = C_1^{(2)}$.

Таким образом, нормированные с. ф. $\Psi_{S,0}$ имеют вид

$$\Psi_{1(0),0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \pm \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}. \quad (2)$$

Спиновые функции имеют определенную симметрию по отношению к перестановке спиновых переменных обеих частиц: они симметричны при $S = 1$ и антисимметричны при $S = 0$ в соответствии с результатом 3.30 (имея его в виду, выражение (2) для $\Psi_{S, S_z=0}$ можно было написать непосредственно без вычислений).

5.11. Запишем спиновую функцию в виде суперпозиции симметричного и антисимметричного слагаемых:

$$\Psi_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} [\varphi_\alpha \chi_\beta + \chi_\alpha \varphi_\beta] + \frac{1}{2} [\varphi_\alpha \chi_\beta - \chi_\alpha \varphi_\beta]. \quad (1)$$

Имея в виду характер симметрии функций Ψ_{SS_z} (см. предыдущую задачу), замечаем, что первое, симметричное, слагаемое в (1) отвечает $S = 1$, а второе, антисимметричное, — значению $S = 0$. При этом (считаем спиновые функции φ_α и χ_β , как и $\Psi_{\alpha\beta}$, нормированными на единицу) норма каждого из этих слагаемых определяет вероятность соответствующего значения S , так что

$$\begin{aligned} \omega(S=0, 1) &= \frac{1}{4} (\varphi_\alpha^* \chi_\beta^* \mp \chi_\alpha^* \varphi_\beta^*) (\varphi_\alpha \chi_\beta \mp \chi_\alpha \varphi_\beta) = \\ &= \frac{1}{2} (1 \mp |\langle \varphi | \chi \rangle|^2), \end{aligned}$$

знак $+$ отвечает $S = 1$; наконец $\overline{S^2} = 2\omega(S=1)$.

5.12. 1) Так как $\hat{S}^2 = \frac{1}{4}(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)^2$, то $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 = -3 +) = 0$

с. ф. оператора \hat{S}^2 являются также собственными функциями и оператора $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$, отвечающими с. з., равным -3 (при $S = 0$) и $+1$ (при $S = 1$).

2) Так как у эрмитова оператора $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$ только два различных с. з., имеет место соотношение $(\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 - 1)(\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 + 3) = 0$ (сравнить с 1.21); отсюда $(\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2)^2 = 3 - 2\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$.

5.13. Запишем спиновую функцию системы в виде

$$\Psi_{\alpha\beta} = \Psi_{\alpha\beta}^+ + \Psi_{\alpha\beta}^-, \quad \text{где} \quad \Psi_{\alpha\beta}^\pm = (\Psi_{\alpha\beta} \pm \Psi_{\beta\alpha})/2.$$

Имея в виду характер симметрии функций Ψ_{SS_z} , замечаем, что $\Psi_{\alpha\beta}^+$ отвечает суммарному спину $S = 1$, а $\Psi_{\alpha\beta}^-$ — значению $S = 0$ (сравнить с (5.11)). Поэтому $\hat{S}^2\Psi_{\alpha\beta} = 2\Psi_{\alpha\beta}^+$ и соответственно

$$\Psi_{\alpha\beta}^- = \Psi_{\alpha\beta} - \frac{1}{2}\hat{S}^2\Psi_{\alpha\beta}.$$

Согласно определению \hat{C} имеем $\hat{C}\Psi_{\alpha\beta} = \Psi_{\alpha\beta}^+ - \Psi_{\alpha\beta}^-$. Из приведенных соотношений следует

$$\hat{C} = \hat{S}^2 - 1 = \frac{1}{2}(1 + \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2)$$

(о связи операторов \hat{S}^2 и $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$ см. предыдущую задачу).

Отметим свойства оператора \hat{C} . Это — эрмитов оператор. Спиновые функции Ψ_S (S — суммарный спин) являются его с. ф., а соответствующие с. з. равны $+1$ при $S = 1$ и -1 при $S = 0$; очевидно также $\hat{C}^2 = 1$.

5.14. Напомним сначала, что $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 = -3 + 2\hat{S}_z^2$, $\hat{S}_z = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z})$.

а) Спиновые функции Ψ_S являются также с. ф. оператора $\hat{f} = a + b\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$, отвечающими с. з. $f_S = a - 3b + 2bS(S + 1)$; соответственно с. з. оператора V_1 равны $(V_1)_S = F(f_S)$.

б) Спиновые функции Ψ_{SS_z} являются с. ф. оператора V_2 , отвечающими с. з. $(V_2)_{SS_z} = 2a\hat{S}_z^2 - 3b + 2bS(S + 1)$.

в) Так как $\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z} = 2\hat{S}_z^2 - 1$, то, как и в б), функции Ψ_{SS_z} являются с. ф. \hat{V}_3 , а с. з. равны $(V_3)_{SS_z} = -a + 2a\hat{S}_z^2 - 3b + 2bS(S + 1)$.

г) Найдем вид оператора

$$\hat{V}_4 = \frac{1}{2} (a_1 + a_2) (\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}) + \frac{1}{2} (a_1 - a_2) (\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}) + b \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$$

в SS_z -представлении, где он является матрицей с элементами $\langle S' S_z' | \hat{V}_4 | SS_z \rangle$. Используя в матричных элементах следующую нумерацию состояний, определяемых квантовыми числами S, S_z :

$$S = 1, S_z = 1 \rightarrow 1; (1, -1) \rightarrow 2; (1, 0) \rightarrow 3; (0, 0) \rightarrow 4,$$

и учитывая явный вид спиновых функций Ψ_{SS_z} (см. 5.10), находим

$$\hat{V}_4 = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & E \\ 0 & 0 & E^* & D \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} A &= a_1 + a_2 + b, \\ B &= -a_1 - a_2 + b, \\ C &= b, \quad D = -3b, \\ E &= E^* = a_1 - a_2. \end{aligned} \quad (1)$$

Унитарным преобразованием эта эрмитова матрица может быть приведена к диагональному виду, непосредственно определяющему ее с.з. Из вида матрицы \hat{V}_4 легко заключить, что два ее с.з. равны $(V_4)_1 = A$ и $(V_4)_2 = B$ и им отвечают с.ф., равные $\Psi_{S=1, S_z=1}$ и $\Psi_{1, -1}$ соответственно. Унитарный оператор (матрица), диагонализующий \hat{V}_4 , «перемешивает» лишь состояния с квантовыми числами $(1, 0)$ и $(0, 0)$, и задача отыскания двух других с.з. сводится к диагонализации двухрядной матрицы $\begin{pmatrix} C & E \\ E^* & D \end{pmatrix}$. Их легко найти, если учесть, что при унитарных преобразованиях след и детерминант матрицы не изменяются (см. 1.51); отсюда получаем

$$(V_4)_{3,4} = -b \pm \sqrt{(a_1 - a_2)^2 + 4b^2}.$$

5.15. Спин любых n частиц имеет определенное значение, равное ns . При этом спиновая функция симметрична по отношению к взаимной перестановке спиновых переменных любых двух частиц (сравнить с 3.30). Если же $S < N/2$ для $s = 1/2$, то при $N > 2$ спиновая функция уже не имеет определенной симметрии при перестановке любых двух частиц (см., например, 5.19).

5.16. Учитывая, что

$$\hat{S}^2 = \frac{1}{4} \left(\sum_{a=1}^N \hat{\sigma}_a \right)^2 = \frac{1}{4} \left(\sum_a \hat{\sigma}_a^2 + \sum_{a \neq b} \hat{\sigma}_a \hat{\sigma}_b \right),$$

$\hat{\sigma}_a^2 = 3$ и что в рассматриваемом состоянии между спинами отдельных частиц нет корреляции и средние значения $\overline{\hat{\sigma}_a}$ равны

$$\overline{(\hat{\sigma}_a)_i} = \begin{cases} 0, & i = 1, 2, \\ 1, & i = 3, \quad a \leq n, \\ -1, & i = 3, \quad a \geq n + 1, \end{cases}$$

легко находим $\overline{S^2} = (N^2 - 4nN + 2N + 4n^2)/4$.

При $n = 1$ и $n = N - 1$ суммарный спин может принимать лишь два значения: $S_1 = N/2$ и $S_2 = (N - 2)/2$ ($N \geq 2$), вероятности которых легко найти, имея в виду значение $\overline{S^2}$:

$$\omega(S = N/2) = 1/N, \quad \omega(S = (N - 2)/2) = (N - 1)/N$$

(сравнить с 3.29).

5.17. Имеем $\overline{j^2} = 11/4 + 2ms_z$ (сравнить с 3.29). Так как возможны лишь два значения полного момента: $j = l \pm 1/2$, то значение $\overline{j^2}$ позволяет найти их вероятности:

$$\omega(l + 1/2) = (l + 2ms_z + 1)/(2l + 1),$$

$$\omega(l - 1/2) = (l - 2ms_z)/(2l + 1)$$

5.18. «Спиновая» функция для состояния с $J = 3/2$, $J_z = 3/2$ имеет вид

$$\Psi_{3/2, 3/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2,$$

при этом проекции « l_z » и « s_z » имеют определенные значения, равные 1 и 1/2. Подействовав на эту функцию оператором $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y = \hat{j}_{1,-} + \hat{j}_{2,-}$, находим (вид оператора \hat{j}_- для $j = 1$ см. в 3.22):

$$\begin{aligned} \Psi_{3/2, 1/2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1) \end{aligned}$$

множитель $3^{-1/2}$ введен для нормировки. Из (1) следуют иско-
мые вероятности в состоянии с $J = 3/2$ и $J_z = 1/2$:

$$\omega(l_z = 1) = \omega(s_z = -1/2) = 1/3, \quad \omega(l_z = 0) = \omega(s_z = 1/2) = 2/3$$

и средние значения $\bar{l}_z = 1/3$, $\bar{s}_z = 1/6$.

Записав «спиновую» функцию для состояния с $J = 1/2$ и $J_z = 1/2$ в виде

$$\Psi_{1/2, 1/2} = C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

и воспользовавшись ортогональностью ее к $\Psi_{3/2, 1/2}$, находим значения $C_1 = -\sqrt{2}$, $C_2 = \sqrt{2/3}$ (с учетом нормировки), а с ними искомые вероятности в состоянии с $J = 1/2$, $J_z = 1/2$:

$$\omega(l_z = 1) = \omega(s_z = -1/2) = 2/3, \quad \omega(l_z = 0) = \omega(s_z = 1/2) = 1/3$$

и средние $\bar{l}_z = 2/3$, $\bar{s}_z = -1/6$.

Результаты для состояний с $J_z < 0$ могут быть получены аналогично и представляются очевидными.

5.19. Возможные значения суммарного спина: $S = 3/2$ и $1/2$.

Теперь набор с. з. $S = 1/2$, S_z является вырожденным в том смысле, что при $S = 1/2$ и данном S_z имеется два независимых спиновых состояния. Действительно, значение $S = 1/2$ может быть получено двумя независимыми (при данном S_z) способами: 1) путем сложения спинов первых двух частиц в их результирующий спин $S_{12} = 0$, при этом значение полного спина системы определяется спином третьей частицей, 2) путем сложения результирующего спина $S_{12} = 1$ со спином третьей частицы в суммарный спин $S = 1/2$. Так как число независимых спиновых состояний при данном S (в отсутствие вырождения по S , S_z) равно $2S + 1$, то общее число независимых спиновых состояний равно $(2 \cdot 3/2 + 1) + 2(2 \cdot 1/2 + 1) = 8$, как и следует.

Вид спиновых функций $\Psi_{S=3/2, S_z=\pm 3/2}$ очевиден:

$$\Psi_{3/2, 3/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3, \quad \Psi_{3/2, -3/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3. \quad (1)$$

Также без вычислений можно указать спиновые функции при $S = 3/2$, $S_z = \pm 1/2$, имея в виду их симметричность по отношению к перестановке спиновых переменных любых двух частиц, для которых их результирующий спин равен 1 (сравнить

$$\Psi_{3/2, 1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 + \right. \\ \left. + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 \right\}, \quad (2)$$

$$\Psi_{3/2, -1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 + \right. \\ \left. + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 \right\}.$$

Далее, если спиновая функция отвечает результирующему спину первых двух частиц, равному $S_{12} = 0$, то она, очевидно, описывает состояние с $S = 1/2$. Поэтому

$$\Psi_{1/2, 1/2}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3, \quad (3)$$

$$\Psi_{1/2, -1/2}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3.$$

Вторую пару функций $\Psi_{1/2, \pm 1/2}^{(2)}$, линейно независимых по отношению к (3), можно найти, рассмотрев состояния с результирующим спином $S_{23} = 0$ второй и третьей частиц:

$$\Psi_{1/2, 1/2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 \right\}, \quad (4)$$

$$\Psi_{1/2, -1/2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 \right\}.$$

Отметим, что хотя функции (3) и (4) линейно независимы, они при одинаковых значениях S_z не являются ортогональными. Наиболее общая спиновая функция состояния с $S = 1/2$ представляет суперпозицию функций (3), (4). Читателю предлагается рассмотреть состояние с результирующим спином $S_{13} = 0$, также отвечающее $S = 1/2$, и убедиться в том, что соответствующая функция выражается через функции (3) и (4).

В заключение отметим, что спиновые функции состояний с суммарным спином $S = 1/2$ не обладают определенной симметрией по отношению к перестановке спиновых переменных любой пары частиц. Так, хотя первая из функций (3) антисимметрична при перестановке спиновых переменных 1-й и 2-й частиц, при перестановке 1-й и 3-й частиц она переходит совсем в другую функцию (в $-\Psi_{1/2, 1/2}^{(2)}$).

5.20. Указанные функции легко найти, имея в виду результат задачи 5.3, см. также (V. 4):

$$\Psi_{p_0, \lambda=1/2} = \frac{e^{i p_0 r / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} \cos(\tilde{\theta}/2) \\ e^{i\Phi} \sin(\tilde{\theta}/2) \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{p_0, \lambda=-1/2} = \frac{e^{i p_0 r / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} \sin(\tilde{\theta}/2) \\ -e^{i\Phi} \cos(\tilde{\theta}/2) \end{pmatrix},$$

здесь $\tilde{\theta}$, $\tilde{\varphi}$ — полярный и азимутальный углы вектора p_0 .

5.21. Подействовав на указанную функцию оператором \hat{j}^2 , приходим к выражению $(\hat{1} + \hat{\sigma}/2)^2 (\hat{\sigma}n) \chi$. Учитывая соотношение³⁾ $[\hat{j}_i, \hat{\sigma}n] = 0$ и равенство $\hat{1}\chi = 0$, приводим это выражение к виду $(\hat{\sigma}n) (\hat{\sigma}/2)^2 \chi$, или $(3/4) (\hat{\sigma}n) \chi$. Отсюда следует, что $\hat{j}^2 \Psi = (3/4) \Psi$, т. е. j имеет определенное значение, равное $1/2$. То обстоятельство, что указанная функция отвечает значению $l = 1$, следует из ее линейной зависимости от вектора n (сравнить с 3.42).

Так как $\Psi^* \Psi = \chi^* (\hat{\sigma}n)^2 \chi = \chi^* \chi = \text{const}$ и не зависит от n , то распределение по направлениям импульса (или радиуса-вектора) является изотропным, как и в случае s -состояния, а условие нормировки $\int \Psi^* \Psi d\Omega = 1$ будет выполнено при $\chi^* \chi = |a|^2 + |b|^2 = 1/4\pi$.

Наконец, из соотношения

$$\bar{J} = \langle \Psi | \hat{J} | \Psi \rangle = \int \chi^* (\hat{\sigma}n) \left(\hat{1} + \frac{\hat{\sigma}}{2} \right) (\hat{\sigma}n) \chi d\Omega = 4\pi \chi^* \frac{\hat{\sigma}}{2} \chi$$

следует, что вектор полного момента в рассматриваемом состоянии точно такой же, как и вектор спина в состоянии со спиновой функцией χ . Соответственно, выбрав $\sqrt{4\pi} \chi$ в виде $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, получим нормированные функции $p_{1/2}$ -состояний с $j_z = +1/2$ и $-1/2$; так

$$\Psi_{j=1/2, l=1, j_z=1/2} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \hat{\sigma}n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \cdot e^{i\Phi} \end{pmatrix}.$$

Аналогично можно найти спин-угловую функцию состояния с $j_z = -1/2$; сравнить полученные результаты с 5.24.

5.22. Приведенные в. ф. являются суперпозициями функций $s_{1/2}$ -состояния χ и $p_{1/2}$ -состояния $(\hat{\sigma}n)\chi$ (см. 5.21) и поэтому

³⁾ В связи с приведенным значением коммутатора см. также 3.5 и 3.28.

ответчают определенному значению $j=1/2$ полного момента. Орбитальный же момент l , как и четность, не имеет определенного значения. Имея в виду одинаковую нормировку указанных выше функций, заключаем; что l с одинаковой вероятностью $1/2$ может принимать два возможных значения: 0 и 1. Далее, замечаем, что $\hat{\lambda}\Psi_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \Psi_{\pm}$ (так что проекция спина на направление вектора \mathbf{n} имеет определенное значение, равное соответственно $\pm 1/2$). При инверсии координат функции Ψ_{\pm} взаимно переходят друг в друга.

5.23. Наиболее общая спин-угловая зависимость в.ф. состояния с $l=1$ имеет вид $\Psi_{l=1} = (c\mathbf{n})\chi$, где c и χ уже не зависят от \mathbf{n} , сравнить с 3.42. Эта функция не отвечает, вообще говоря, определенному значению j , а представляет суперпозицию состояний с $j=1/2$ и $j=3/2$. Чтобы выделить из нее часть, соответствующую $j=3/2$, воспользуемся проекционным оператором

$$\hat{P}_{j=3/2} = \frac{1}{3} (2 + \hat{1}\hat{\sigma}),$$

сравнить ⁴⁾ с 3.36. Легко находим

$$\Psi_{j=3/2} = \hat{P}_{j=3/2} \Psi_{l=1} = \frac{1}{3} c (2\mathbf{n} + i[\mathbf{n}\hat{\sigma}]) \chi \quad (1)$$

в согласии с условием задачи. Читателю предлагается самостоятельно нормировать в.ф. и убедиться в том, что она ортогональна в.ф. $p_{1/2}$ -состояния из 5.21. Отметим, что число независимых функций $\Psi_{l=1}$ равно 6 (три независимых способа выбора вектора c и два — спинора χ); независимых же функций вида (1) лишь 4, так как они получаются исключением из $\Psi_{l=1}$ двух независимых функций ⁵⁾, отвечающих $j=1/2$.

Функция $\Psi_{l=1}$ при выборе $c = (0, 0, 1)$ и $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ описывает состояние с $l_z = 0$ (см. 3.18), $s_z = 1/2$ и соответственно с $j_z = 1/2$; при этом j не имеет определенного значения. Функция же (1) для таких c и χ имеет вид

$$\Psi_{3/2, 1, 1/2} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 \cos \theta \\ -e^{i\varphi} \sin \theta \end{pmatrix}$$

⁴⁾ См. также 5.24.

⁵⁾ Заметим, что функцию (1) можно записать в виде $\Psi_{j=3/2} = \mathbf{nV}^{\alpha}$, где спин-векторная величина $\mathbf{V}^{\alpha} = (2c - i[\mathbf{c}\hat{\sigma}])\chi^{\alpha}$. Такой спин-вектор удовлетворяет дополнительному условию $\hat{\sigma}\mathbf{V}^{\alpha} = 0$, соответствующему исключению состояний с $j=1/2$ (сравнить с 5.27).

и описывает состояние с $j = 3/2$, $l = 1$ и $j_z = 1/2$ (так как \hat{P}_j коммутирует с операторами \hat{I}^2 и \hat{j}_z , то с. ф. последних и после действия \hat{P}_j остаются их с. ф.).

Аналогично можно найти в. ф. и других $p_{3/2}$ -состояний. Так, выбрав $s = (1, i, 0)$ и $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, получим $\Psi_{3/2, 1, 3/2}$ и т. д.; сравнить с результатом 5.24.

5.24. 1) Рассмотрим спин-угловую функцию вида $\Psi = \begin{pmatrix} Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix}$, описывающую состояние частицы с определенными значениями l , m , $s_z = 1/2$ и $j_z = m + 1/2$. Она не является с. ф. \hat{j}^2 , а представляет суперпозицию состояний с $j = l \pm 1/2$ (кроме случая $m = l$, когда $j = l + 1/2$). Подействовав на эту функцию проекционным оператором⁶⁾ \hat{P}_j для состояния с заданным j

$$\hat{P}_{j=l \pm 1/2} = (l + 1/2 \pm 1/2 \pm \hat{\sigma} \hat{I}) / (2l + 1)$$

и учтя соотношения, аналогичные (III. 8):

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} \hat{I} &= 2\hat{l} \hat{s} = 2\hat{l}_z \hat{s}_z + \hat{l}_+ \hat{s}_- + \hat{l}_- \hat{s}_+, \\ \hat{j}_+ \Psi_{j, j_z} &= \sqrt{(j - j_z)(j + j_z + 1)} \Psi_{j, j_z + 1}, \\ \hat{j}_- \Psi_{j, j_z} &= \sqrt{(j + j_z)(j - j_z + 1)} \Psi_{j, j_z - 1}, \end{aligned} \quad (1)$$

легко находим явный вид искоемых функций:

$$\begin{aligned} \Psi_{l+1/2, l, j_z=m+1/2} &= C_1 \hat{P}_{l+1/2} \Psi = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1} Y_{lm} \\ \sqrt{l-m} Y_{l, m+1} \end{pmatrix}, \\ \Psi_{l-1/2, l, m+1/2} &= C_2 \hat{P}_{l-1/2} \Psi = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l-m} Y_{lm} \\ -\sqrt{l+m+1} Y_{l, m+1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2)$$

где коэффициенты $C_{1,2}$ выбраны из условия нормировки в. ф. на единицу. Из (2) видна ортогональность функций:

$$\langle j_1, l, j_z | j_2, l, j_z \rangle = 0, \quad \text{где } j_{1,2} = l \pm 1/2.$$

2) Очевидно $\Psi_{l+1/2, l, l+1/2} = \begin{pmatrix} Y_{ll} \\ 0 \end{pmatrix}$. Подействовав на эту функцию оператором \hat{j}_-^n , где $n = l + 1/2 - j_z$, получим $\Psi_{l+1/2, l, j_z}$.

⁶⁾ Вид которого следует из 1.35, если учесть при этом также 3.27.

Учитывая, что $\hat{j}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_-$, $\hat{s}_-^2 = 0$, и поэтому

$$\hat{j}_-^n = \hat{l}_-^n + n\hat{l}_-^{n-1}\hat{s}_-,$$

а также соотношения (1), приходим к уже известной из (2) функции

$$\begin{aligned} \Psi_{l+1/2, l, m+1/2} &= C \hat{j}_-^{l-m} \begin{pmatrix} Y_{ll} \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1} Y_{lm} \\ \sqrt{l-m} Y_{l, m+1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

5.25. Утверждение задачи можно проверить непосредственным вычислением, но проще его подтвердить следующим рассуждением, основанным на коммутативности операторов \hat{l}_l и $(\hat{\sigma}_n)$ и псевдоскалярном характере последнего.

Пусть $\Psi_{l_2 l_z}$ — с. ф. операторов $\hat{j}^2, \hat{l}^2, \hat{j}_z$, причем $l_2 = j - 1/2$. Эта функция имеет определенную четность, равную $l_2 = (-1)^{l_2}$. Рассмотрим теперь функцию

$$\tilde{\Psi} = (\hat{\sigma}_n) \Psi_{l_2 l_z}.$$

Для нее легко находим

$$\hat{j}_z \tilde{\Psi} = \hat{j}_z (\hat{\sigma}_n) \Psi_{l_2 l_z} = (\hat{\sigma}_n) \hat{j}_z \Psi_{l_2 l_z} = j_z (\hat{\sigma}_n) \Psi_{l_2 l_z} = j_z \tilde{\Psi},$$

$$\hat{j}^2 \tilde{\Psi} = \hat{j}^2 (\hat{\sigma}_n) \Psi_{l_2 l_z} = (\hat{\sigma}_n) \hat{j}^2 \Psi_{l_2 l_z} = j(j+1) \tilde{\Psi},$$

$$\hat{l} \tilde{\Psi} = \hat{l} (\hat{\sigma}_n) \Psi_{l_2 l_z} = -(\hat{\sigma}_n) \hat{l} \Psi_{l_2 l_z} = (-1)^{l_2+1} \tilde{\Psi}.$$

Отсюда следует, что $\tilde{\Psi}$ также является с. ф. операторов $\hat{j}^2, \hat{j}_z, \hat{l}$, причем четность ее противоположна четности в. ф. $\Psi_{l_2 l_z}$. Так как при данном j возможны лишь два значения l , равные $l_{1,2} = j \pm 1/2$, а четность состояния равна $(-1)^l$, то $\tilde{\Psi}$ отвечает значению $l = j + 1/2$. Таким образом, функция $\tilde{\Psi}$ является с. ф. операторов $\hat{j}^2, \hat{l}^2, \hat{j}_z$, так что $\Psi_{l_1 l_z} \equiv \tilde{\Psi} = (\hat{\sigma}_n) \Psi_{l_2 l_z}$. Отметим, что после усреднения по спиновому состоянию частицы возникает соотношение

$$\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \Psi_{l_2 l_z} | (\hat{\sigma}_n)^2 | \Psi_{l_2 l_z} \rangle = \langle \Psi_{l_2 l_z} | \Psi_{l_2 l_z} \rangle,$$

7) Сравнить с 3.5 и 3.28.

выражающее одинаковый характер угловых распределений (по направлениям \mathbf{n}) в состояниях с в. ф. $\Psi_{l_1 l_2}$ и $\Psi_{l_2 l_1}$.

Теперь легко сообразить, что

$$\Psi_{l l_2, \lambda = \pm 1/2} = (1/\sqrt{2}) (1 \pm (\hat{\sigma}\mathbf{n})) \Psi_{l_1 l_2}$$

и, учтя явный вид функций $\Psi_{l l_2}$ из предыдущей задачи, найти

$$\Psi_{l l_2, \lambda = 1/2} = \sqrt{\frac{2}{2l+1}} \left\{ \sqrt{l+m+1} \cos(\theta/2) Y_{lm} + \sqrt{l-m} \sin(\theta/2) e^{-i\varphi} Y_{l, m+1} \right\} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{l l_2, \lambda = -1/2} = \sqrt{\frac{2}{2l+1}} \left\{ \sqrt{l+m+1} \sin(\theta/2) Y_{lm} - \sqrt{l-m} \cos(\theta/2) e^{-i\varphi} Y_{l, m+1} \right\} \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ -e^{i\varphi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix},$$

где $m = j_z - 1/2$, при этом спиновая часть в. ф. такая же, как и в 5.3.

5.26. Для $s = 1$ описание спиновых свойств частицы с помощью симметричного спинора $\psi^{\alpha\beta}$ аналогично рассмотрению состояний с суммарным спином 1 в системе из двух спинов с $s = 1/2$, сравнить с 5.10, 5.11. Отсюда, по аналогии с соотношением $\hat{S} = (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)/2$, сразу следует вид операторов компонент спина в спинорном представлении:

$$\hat{s}\psi^{\alpha\beta} \equiv s_{\mu\nu}^{\alpha\beta} \psi^{\mu\nu}, \quad s_{\mu\nu}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\sigma_{\mu}^{\alpha} \cdot \delta_{\nu}^{\beta} + \delta_{\mu}^{\alpha} \cdot \sigma_{\nu}^{\beta}). \quad \ddagger \quad (1)$$

Связь между в. ф. $\psi^{\alpha\beta}$ в спинорном представлении и в. ф. $\psi(\sigma)$ в s_z -представлении определяется соотношением ⁸⁾

$$\psi^{\alpha\beta} = \sum_{s_z} \psi(s_z) \psi_{s_z}^{\alpha\beta}, \quad (2)$$

где спинор $\psi_{s_z}^{\alpha\beta}$ является с. ф. оператора \hat{s}_z . Эти спиноры, отвечающие различным значениям s_z , имеют вид

$$\psi_{s_z=1}^{\alpha\beta} = \delta_1^{\alpha} \delta_1^{\beta}, \quad \psi_{s_z=0}^{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\delta_1^{\alpha} \delta_2^{\beta} + \delta_2^{\alpha} \delta_1^{\beta}), \quad \psi_{s_z=-1}^{\alpha\beta} = \delta_2^{\alpha} \delta_2^{\beta} \quad (3)$$

⁸⁾ Обратим внимание на двойкий смысл переменной s_z в соотношении (2): как аргумент в. ф. $\psi(s_z)$ она имеет смысл переменной s_z -представления, а в случае спинора $\psi_{s_z}^{\alpha\beta}$ является с. з. оператора \hat{s}_z .

(сравнить с 5.10), компоненты спинора δ_β^α равны $\delta_1^1 = \delta_2^2 = 1$, $\delta_2^1 = \delta_1^2 = 0$. Из (2), (3) следует

$$\psi^{11} = \psi(1), \quad \psi^{22} = \psi(-1), \quad \psi^{12} = \psi^{21} = \psi(0)/\sqrt{2}. \quad (4)$$

Переход для спина $s = 1$ к векторному представлению аналогичен рассмотренному в 3.44 в случае орбитального момента $l = 1$. В этом представлении

$$\hat{s}_i V_k \equiv s_{i,kl} V_l, \quad s_{i,kl} = -i e_{ikl}. \quad (5)$$

Обобщение соотношения (2) на векторное представление имеет вид

$$\mathbf{V} = \sum \psi(\sigma) \mathbf{v}_\sigma.$$

Здесь векторы \mathbf{v}_σ , являющиеся с. ф. оператора \hat{s}_z , равны⁹⁾

$$\mathbf{v}_{s_z = \pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (1, \pm i, 0), \quad \mathbf{v}_{s_z = 0} = (0, 0, 1) \quad (6)$$

(сравнить с 3.41). Ввиду взаимной ортогональности этих векторов имеем $\psi(\sigma) = \mathbf{V} \mathbf{v}^*(\sigma)$, откуда следует связь в. ф. в векторном и в s_z -представлениях:

$$\begin{aligned} \psi(\pm 1) &= (\mp V_x + iV_y)/\sqrt{2}, & \psi(0) &= V_z, \\ V_x &= (\psi(-1) - \psi(1))/\sqrt{2}, & V_y &= -i(\psi(1) + \psi(-1))/\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (7)$$

С помощью (4), (7) приходим к соотношениям между спинорной и векторной волновыми функциями

$$V_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^{22} - \psi^{11}), \quad V_y = -\frac{i}{\sqrt{2}} (\psi^{11} + \psi^{22}), \quad V_z = \sqrt{2} \psi^{12}. \quad (8)$$

Более наглядно эти соотношения могут быть записаны в виде

$$\mathbf{V} = C \sigma_\alpha^\gamma \psi^{\alpha\beta} g_{\gamma\beta} \equiv C \sigma_\alpha^\gamma \psi_\gamma^\alpha,$$

где $g_{\beta\gamma}$ — антисимметричный единичный спинор второго ранга, компоненты которого равны $g_{12} = -g_{21} = 1$, $g_{11} = g_{22} = 0$, а

⁹⁾ Отметим, что выбор фазовых множителей в выражениях (3), (6) для с. ф. \mathbf{v}_{s_z} , $\psi_{s_z}^{\alpha\beta}$ при различных значениях s_z соответствует принятому в теории момента, см. [1, § 27] (впрочем, в (6) по сравнению с [1] опущен несущественный, общий для всех векторов \mathbf{v}_{s_z} , фазовый множитель, равный i).

$C = 1/\sqrt{2}$; при этом $\psi_\beta^\alpha = \psi^{\alpha\nu} g_{\beta\nu}$, причем $\psi_\alpha^\alpha = 0$ ввиду симметричности спинора $\psi^{\alpha\beta}$. В таком виде связь волновых функций V и $\psi^{\alpha\beta}$ очевидна заранее, так как $\sigma_\beta^\alpha \psi_\alpha^\beta$ является единственным (с точностью до множителя, естественно) вектором, который можно сопоставить спинору $\psi^{\alpha\beta}$. Воспользовавшись также соотношением

$$\sigma_\beta^\alpha \sigma_\nu^\mu = 2\delta_\nu^\alpha \delta_\beta^\mu - \delta_\beta^\alpha \delta_\nu^\mu,$$

получаем

$$\begin{aligned} \psi_\beta^\alpha &= \frac{1}{\sqrt{2}} V \sigma_\beta^\alpha, & V &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_\beta^\alpha \psi_\alpha^\beta, \\ \psi^{\alpha\beta} &= \frac{1}{2} (\psi_\mu^\alpha g^{\mu\beta} + \psi_\mu^\beta g^{\mu\alpha}), & \psi_1^1 &= -\psi_2^2 = \psi^{12}, \\ & & \psi_2^1 &= -\psi^{11}, & \psi_1^2 &= \psi^{22} \end{aligned} \quad (9)$$

(значения компонент контравариантного антисимметричного спинора $g^{\alpha\beta}$ совпадают с $g_{\alpha\beta}$).

Обсудим теперь для частицы со спином $s = 1$ вопрос о спин-орбитальных с. ф. $|\Psi_{jIj_z}\rangle$ (в различных представлениях). Конечно, в общем виде он решается соотношением из теории сложения моментов (орбитального l и спинового $s = 1$ в результирующий j):

$$|\Psi_{jIj_z}\rangle = \sum_{\sigma} C_{lm1\sigma}^{jIj_z} Y_{lm}(\mathbf{n}) |1, \sigma\rangle, \quad (10)$$

где $|1, \sigma\rangle$ — чисто спиновая (т. е. не зависящая от координат) с. ф. оператора \hat{s}_z , отвечающая с. з. $s_z \equiv \sigma$; напомним, что коэффициенты Клебша — Гордана в (10) отличны от нуля лишь при $j_z = m + \sigma$. В соответствии с формой записи соотношения (10) коэффициент перед $|1, \sigma\rangle$ в нем является в. ф. рассматриваемого состояния в s_z -представлении, т. е.

$$\psi_{jIj_z}(\sigma) = C_{lm1\sigma}^{jIj_z} Y_{lm}(\mathbf{n}), \quad m = j_z - \sigma. \quad (11)$$

Если же под $|1, \sigma\rangle$ в соотношении (10) понимать базисные векторы \mathbf{v}_σ из (6), то оно будет описывать спин-угловую часть в. ф. частицы в векторном представлении, а заменив $|1, \sigma\rangle$ на спиноры из (3), приходим к в. ф. в спинорном представлении.

Поучительно, однако, рассмотреть состояния с низшими значениями j , не прибегая к (10), а исходя лишь из общих соображений, связанных с трансформационными свойствами в. ф. состояний, отвечающих различным значениям момента (сравнить с задачами из § 4 главы 3).

Так, для определения вида в. ф. состояния частицы с $l = 1$ и $j = 0$ замечаем, что она должна линейно зависеть от вектора \mathbf{n} (ввиду $l = 1$, см. 3.41) и в силу сферической симметрии состояния с $j = 0$ не должна включать каких-либо «внешних» векторных или спинорных величин. Отсюда сразу следует вид в. ф. в векторном представлении¹⁰): $V_i = c n_i$, или $\mathbf{V} = c \mathbf{n}$, причем $|c| = 1/\sqrt{4\pi}$ из условия нормировки $\int \mathbf{V}^* \mathbf{V} d\Omega = 1$. Конечно, этот результат можно получить и из (10) (коэффициенты Клебша — Гордана для этого случая найдены в 3.39). Теперь по формулам (9) легко находим в. ф. рассматриваемого состояния с $l = 1, j = 0$ в спинорном представлении

$$\begin{aligned} \psi^{11} &= -\frac{c}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} \sin \theta, & \psi^{12} &= \frac{c}{\sqrt{2}} \cos \theta, \\ \psi^{22} &= \frac{c}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} \sin \theta, \end{aligned} \quad (12)$$

где θ, φ — полярный и азимутальный углы направления вектора \mathbf{n} , а по формулам (4) или (7) находим в. ф. в s_z -представлении:

$$\begin{aligned} \psi(1) &= Y_{1,-1}(\mathbf{n})/\sqrt{3}, & \psi(0) &= -Y_{10}(\mathbf{n})/\sqrt{3}, \\ \psi(-1) &= Y_{11}(\mathbf{n})/\sqrt{3} \end{aligned}$$

в согласии с (11).

В заключение сделаем замечание о виде спин-угловых в. ф. в случае $j \neq 0$ на примере состояний частицы с $l = 1$. Теперь в. ф. включают «внешние» тензоры, характеризующие состояния с отличным от нуля моментом j , сравнить с 3.41. В частности, в векторном представлении искомые в. ф. имеют вид

$$\mathbf{V}_{j-1} = (3/8\pi)^{1/2} [\varepsilon \mathbf{n}], \quad \mathbf{V}_{j-2, l} = (3/4\pi)^{1/2} \varepsilon_{ik} n_k, \quad (13)$$

причем из условия нормировки $\varepsilon^* \varepsilon = 1, \varepsilon_{ik}^* \varepsilon_{ik} = 1$. Конкретный выбор $\varepsilon(j_z), \varepsilon_{ik}(j_z)$, при котором векторные функции (13)

¹⁰ Примером частицы со спином $s = 1$ является фотон. При этом ввиду специфического свойства фотона, связанного с поперечностью электромагнитного поля, его в. ф. — векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ (в импульсном представлении) — должна удовлетворять дополнительному условию вида $\mathbf{p} \mathbf{A}(\mathbf{p}) = 0$ (или $\text{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$, см. главу 14). Найденная функция $\mathbf{A} = f(p) \mathbf{p}$ состояния с $j = 0$ этому условию не удовлетворяет. Это означает, что состояний фотона с $j = 0$ не существует, и указывает на невозможность его излучения системой, если ее полный момент как в начальном, так и в конечном состояниях равен нулю: «0 — 0»-переходы запрещены.

описывают состояние с определенным значением j_z , определяется результатом из 3.41. Вид в.ф. в других представлениях может быть найден, как и выше в случае $j = 0$.

5.27. Для частицы со спином $s = 3/2$ описание спиновых свойств с помощью симметричного спинора $\psi^{\alpha\beta\gamma}$ аналогично рассмотрению состояний с суммарным спином $3/2$ в системе из трех спинов с $s = 1/2$, сравнить с 5.19. Так же как и в предыдущей задаче, имеем

$$s_{\mu\nu\tau}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{2} (\sigma_{\mu}^{\alpha} \delta_{\nu}^{\beta} \delta_{\tau}^{\gamma} + \delta_{\mu}^{\alpha} \sigma_{\nu}^{\beta} \delta_{\tau}^{\gamma} + \delta_{\mu}^{\alpha} \delta_{\nu}^{\beta} \sigma_{\tau}^{\gamma}),$$

$$\psi^{111} = \psi \left(\frac{3}{2} \right), \quad \psi^{112} = \frac{1}{\sqrt{3}} \psi \left(\frac{1}{2} \right), \quad (1)$$

$$\psi^{122} = \frac{1}{\sqrt{3}} \psi \left(-\frac{1}{2} \right), \quad \psi^{222} = \psi \left(-\frac{3}{2} \right)$$

(здесь приведены лишь независимые компоненты спинора).

Переход к спин-векторному представлению осуществляется с помощью отмеченной в предыдущей задаче (см. формулы (9)) связи спинора второго ранга с вектором:

$$V^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma^{\nu}_{\beta} g_{\nu\gamma} \psi^{\alpha\beta\gamma} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma^{\nu}_{\beta} \psi^{\alpha\beta}. \quad (2)$$

Отсюда автоматически вытекает дополнительное условие¹¹⁾ $\sigma^{\alpha}_{\beta} V^{\beta} = 0$. Операторы компонент спина в этом представлении имеют вид (сравнить с предыдущей задачей)

$$(s_l)_{\mu, kl}^{\alpha} = -ie_{ikl} \delta_{\mu}^{\alpha} + \frac{1}{2} \delta_{kl} \sigma_{l, \mu}^{\alpha}. \quad (3)$$

Для определения вида в.ф. состояний с $l = 1$ и $j = 1/2$ следует учесть, что они должны линейно зависеть от вектора \mathbf{p} и от «внешнего» спинора χ^{α} , задающего состояние системы с моментом $j = 1/2$. При этом выбор спинора χ^{α} в виде δ_1^{α} и δ_2^{α} соответствует состояниям системы с $j_z = 1/2$ и $-1/2$. Волновая функция состояния частицы с $j = 1/2$, $l = 1$ в спинорном представлении имеет наиболее простой вид для «смешанных»

¹¹⁾ Доказательство его основано на использовании соотношения

$$\sigma^{\alpha}_{\beta} \sigma^{\gamma}_{\nu} = 2\delta_{\nu}^{\alpha} \delta_{\beta}^{\gamma} - \delta_{\beta}^{\alpha} \delta_{\nu}^{\gamma}$$

и равенства $\psi_{\alpha}^{\dot{\alpha}\beta} = 0$.

(с ко- и контравариантными индексами) компонент спинора

$$\psi_{\gamma}^{\alpha\beta} = C \left\{ n\sigma^{\alpha}_{\gamma}\chi^{\beta} + n\sigma^{\beta}_{\gamma}\chi^{\alpha} - \frac{1}{3} (n\sigma^{\alpha}_{\mu}\chi^{\mu}\delta_{\gamma}^{\beta} + n\sigma^{\beta}_{\mu}\chi^{\mu}\delta_{\gamma}^{\alpha}) \right\} \quad (4)$$

(здесь учтены как симметричность спинора по верхним индексам, так и равенство $\psi_{\alpha}^{\alpha\beta} = 0$ для спинора $\psi_{\gamma}^{\alpha\beta} = g_{\gamma\nu}\psi^{\alpha\beta\nu}$). Не останавливаясь подробно на анализе в. ф. состояния в s_z -представлении, ограничимся видом лишь одной компоненты:

$$\psi \left(\sigma = +\frac{3}{2} \right) = \psi^{111} = -\psi_2^{11} = -2C \sin \theta e^{-i\varphi} \chi^1$$

(пропорциональность ее шаровой функции $Y_{1,-1}(n)$ и компоненте спинора χ^1 , отвечающей значению $j_z = +1/2$, очевидны заранее из физических соображений, так как $j = 1/2$, $l = 1$, $j_z = m + \sigma$, а $\sigma = +3/2$).

Спин-векторная в. ф. V^{α} состояния с $j = 1/2$, $l = 1$ может быть найдена по формулам (2), (4). Воспользовавшись соотношением

$$\sigma_{i,\beta}\sigma_{k,\gamma}^{\alpha} = \delta_{ik}\delta_{\gamma}^{\alpha} + ie_{ikl}\sigma_{l,\gamma}^{\alpha}$$

(сравнить с (V.3)), получаем

$$V^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma^{\gamma}_{\beta} \psi_{\gamma}^{\alpha\beta} = \frac{2\sqrt{2}}{3} C_{\pm} (2n - i[n\hat{\sigma}]) \chi^{\alpha}. \quad (5)$$

Это выражение можно получить несколько иным способом. Для этого заметим, что наиболее общий вид спин-вектора, зависящего линейно от n и χ^{α} , есть

$$V^{\alpha} = c_1 n \chi^{\alpha} + c_2 [n\sigma^{\alpha}_{\beta}] \chi^{\beta}.$$

При этом дополнительное условие $\sigma^{\alpha}_{\gamma} V^{\gamma} = 0$ приводит к соотношению $c_1 = 2ic_2$; отсюда и следует (5), сравнить также с 5.23.

5.28. Спиновая матрица плотности 1-й частицы $\rho_{\sigma\sigma'}^{(1)}$ выражается через спиновую функцию $\Psi_{SS_z}(\sigma_1, \sigma_2)$ системы ($\sigma_{1,2}$ — спиновые переменные частиц) согласно общей формуле (V.5):

$$\rho_{\sigma\sigma'}^{(1)} = \sum_{\sigma_2} \Psi_{SS_z}(\sigma, \sigma_2) \Psi_{SS_z}^*(\sigma', \sigma_2).$$

Воспользовавшись явным выражением для Ψ_{SS_z} из 5.10, находим

$$\rho_{\sigma\sigma'}^{(1)}(S=1, S_z=+1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2}(1 + \hat{\sigma}_z)_{\sigma\sigma'};$$

$$\rho_{\sigma\sigma'}^{(1)}(1, 0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad (1)$$

$$\rho_{\sigma\sigma'}^{(1)}(1, -1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 - \hat{\sigma}_z)_{\sigma\sigma'}; \quad \rho_{\sigma\sigma'}^{(1)}(0, 0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Сравнивая (1) с общим выражением (V.6) для $\hat{\rho}$, замечаем, что в состояниях с $S=1, S_z=0$ и $S=0$ вектор поляризации $\mathbf{P}=0$, т. е. имеем полностью неполяризованные состояния. В случае $S_z=\pm 1$ уже $\mathbf{P}=(0, 0, \pm 1)$ так что $|\mathbf{P}|=1$, т. е. имеем полностью поляризованные состояния; при этом спиновое состояние является «чистым» и $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ (это связано с мультипликативным видом спиновой функции при $S_z=\pm 1$). Матрица плотности 2-й частицы имеет такой же вид, как и для 1-й частицы. Выражения (1) можно было бы написать и без вычислений, имея в виду способ решения, использованный в следующей задаче.

5.29. Спиновая матрица плотности имеет вид $\hat{\rho} = (1/2)(1 + \mathbf{P}\hat{\sigma})$, где $\mathbf{P} = 2\bar{s}$ — вектор поляризации. В данной задаче его легко найти, если воспользоваться результатом из 3.40а):

$$\mathbf{P} = 2\bar{s} = \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{j(j+1)} \bar{j},$$

так что ¹²⁾ $\mathbf{P} = (0, 0, \pm j_z/(l+1/2))$, где знаки (\pm) относятся к значениям $j = l \pm 1/2$. В случае $j_z = \pm j$ при $j = l + 1/2$ имеем $|\mathbf{P}|=1$ и спиновое состояние является «чистым».

5.30. Спин пиона $J_\pi = 0$, так что полный момент J двух пионов в с.ц.и. (она же — система покоя A^0) совпадает с моментом L их относительного движения, $J=L$, и он же (в силу сохранения момента) равен спину частицы J_A , т. е. $J_A=L$. Далее, четность системы из двух пионов (в с.ц.и.) равна $P_{2\pi} = (-1)^L P_\pi P_\pi = (-1)^{J_A}$, здесь $(-1)^L$ — орбитальная четность пары. В силу предполагаемого сохранения четности, внутренняя четность P_A частицы A^0 должна быть равна $P_A = P_{2\pi} = (-1)^{J_A}$. Таким образом, для частицы A^0 возможны лишь следующие квантовые числа: $J_A^P = 0^+, 1^-, 2^+, \dots$

Если частица A^0 находится в состоянии с определенным значением J_z , то у распадных пионов $L_z = J_z$. Фиксирование $L=J$

¹²⁾ Сравнить \bar{j} с \bar{I} из 3.10 а).

и $L_z = J_z$ однозначно определяет угловую зависимость в. ф. двух пионов в виде $Y_{JJ_z}(\mathbf{n})$ ($\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$, p — относительный их импульс). Соответственно угловое распределение продуктов распада имеет вид $d\omega/d\Omega_{\mathbf{n}} = |Y_{JJ_z}(\mathbf{n})|^2$, см. также 5.32.

5.31. В силу сохранения момента для системы пионов из распада $L = 0$. При этом двухпионная система имеет положительную четность (сравнить с предыдущей задачей). В то же время для системы из трех пионов с $L = 0$ (в с. ц. и.) орбитальная четность положительная, см. 3.47, а внутренняя и соответственно полная четность системы — отрицательная (четность является мультипликативной величиной). Существование у одной и той же частицы двух каналов распада с различной четностью конечного состояния указывает на ее несохранение.

5.32. а) В силу сохранения момента у частиц — продуктов распада орбитальный момент относительного движения $L = J$ и $L_z = J_z$, что однозначно определяет угловую зависимость в. ф. в виде $Y_{JJ_z}(\mathbf{n})$ ($\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$, p — относительный импульс распадающих частиц), а с нею и угловое распределение частиц в распаде $d\omega/d\Omega_{\mathbf{n}} = |Y_{JJ_z}(\mathbf{n})|^2$.

б) Пусть $c(m)$ ($m = J, J-1, \dots, -J$) — нормированная спиновая в. ф. распадающейся частицы в J_z -представлении. Она же, в силу сохранения момента, описывает состояние частиц — продуктов распада. Соответственно угловая часть в. ф. имеет вид

$$\Psi(\mathbf{n}) = \sum_m c_m Y_{Jm}(\mathbf{n}),$$

а угловое распределение частиц в распаде описывается выражением

$$\frac{d\omega}{d\Omega_{\mathbf{n}}} = \left| \sum_m c(m) Y_{Jm}(\mathbf{n}) \right|^2 = \sum_{m, m'} c(m) c^*(m') Y_{Jm}(\mathbf{n}) Y_{Jm'}^*(\mathbf{n}). \quad (1)$$

Искомое угловое распределение получается из (1) заменой $c_m c_{m'}^* \rightarrow \rho_{mm'} = c(m) c^*(m')$, где $\hat{\rho}$ — поляризационная матрица плотности распадающейся частицы. В частности, в случае $J = 1$, воспользовавшись явным видом шаровых функций (III. 7), получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{d\Omega} = \frac{3}{8\pi} \{ & (\rho_{11} + \rho_{-1, -1}) \sin^2 \theta + 2\rho_{00} \cos^2 \theta - \\ & - 2 \operatorname{Re} \rho_{1, -1} \cdot \cos 2\varphi \cdot \sin^2 \theta + 2 \operatorname{Im} \rho_{1, -1} \sin 2\varphi \cdot \sin^2 \theta - \\ & - \sqrt{2} \operatorname{Re} \rho_{10} \cdot \cos \varphi \cdot \sin 2\theta + \sqrt{2} \operatorname{Im} \rho_{10} \cdot \sin \varphi \cdot \sin 2\theta + \\ & + \sqrt{2} \operatorname{Re} \rho_{-10} \cdot \cos \varphi \cdot \sin 2\theta + \sqrt{2} \operatorname{Im} \rho_{-10} \cdot \sin \varphi \cdot \sin 2\theta \}, \quad (2) \end{aligned}$$

где θ , φ — полярный и азимутальный углы вектора \mathbf{n} ; $\rho_{11} + \rho_{00} + \rho_{-1, -1} = 1$ (для полностью неполяризованного состояния имеем $\rho_{ik} = \delta_{ik}/3$ и угловое распределение изотропное).

5.33. Прежде всего установим вид спин-угловой зависимости в. ф. πN -системы с моментом $J = 1/2$. Так как у пиона $J_{\pi}^P = 0^{-}$, а у нуклона $J_N^P = 1/2^{+}$, замечаем, что при данном значении J полного момента орбитальный момент L может принимать лишь два значения: $L = J \pm 1/2$. При этом четность πN -системы равна

$$P_{\pi N} = (-1)^L P_{\pi} P_N = (-1)^{L+1},$$

так что фиксирование J и $P_{\pi N}$ однозначно определяет L . Учитывая сказанное, находим:

а) $L = 0$ при $P_B = -1$, так что в. ф. $\Psi^{(\pi N)}$ -системы не зависит от углов и ее спин-угловая зависимость имеет тривиальный вид: $\Psi^{(\pi N)} = \chi^{(N)}$, причем в силу сохранения момента спинор $\chi^{(N)}$ совпадает со спинором $\chi^{(B)}$ описывающим спиновое состояние частицы B . Так как в. ф. не зависит от углов, то угловое распределение продуктов распада является изотропным.

б) Теперь $L = 1$ и спин-угловая часть в. ф. имеет вид $\Psi^{\pi N} = C (\hat{\sigma} \mathbf{n}) \chi$, где $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$ и $\chi = \chi^{(B)}$, см. 5.21. Угловое распределение пионов описывается выражением¹³⁾

$$\frac{d\omega}{d\Omega_{\mathbf{n}}} \propto (\Psi^{\pi N})^* \Psi^{\pi N} = |C|^2 \chi^{(B)*} (\hat{\sigma} \mathbf{n})^2 \chi^{(B)} = |C|^2 \chi^{(B)*} \chi^{(B)} = \text{const},$$

т. е., как и в случае а), является изотропным (об одинаковой зависимости угловых распределений при $L = J \pm 1/2$ см. 5.25).

Наконец, в случае в) в силу несохранения четности четность πN -системы не имеет определенного значения и соответственно спин-угловая зависимость в. ф. представляет суперпозицию в. ф., рассмотренных в а), б):

$$\Psi^{\pi N} = (a + b \hat{\sigma} \mathbf{n}) \chi^{(B)},$$

а угловое распределение продуктов распада имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{d\Omega_{\mathbf{n}}} &\propto (\Psi^{\pi N})^* \Psi^{\pi N} = \chi^{(B)*} (a^* + b^* \hat{\sigma} \mathbf{n}) (a + b \hat{\sigma} \mathbf{n}) \chi^{(B)} = \\ &= \chi^{(B)*} (|a|^2 + |b|^2 + 2 (\text{Re } ab^*) (\hat{\sigma} \mathbf{n})) \chi^{(B)} \propto \\ &\propto \left(1 + \frac{2 \text{Re } ab^*}{|a|^2 + |b|^2} \langle \sigma \rangle_B \mathbf{n} \right); \quad (1) \end{aligned}$$

¹³⁾ После суммирования по независимым спиновым состояниям нуклона. Если же в распаде фиксируется спиновое состояние нуклона, описываемое спинором $\chi_{\lambda}^{(N)}$, то

$$\frac{d\omega_{\lambda}}{d\Omega} \propto |\chi_{\lambda}^{(N)*} (\hat{\sigma} \mathbf{n}) \chi^{(B)}|^2.$$

здесь, как и в случае б), проинтегрировано по независимым спиновым состояниям возникающего в распаде нуклона.

Характерным свойством этого распределения является асимметрия вылета «вперед — назад» пионов в распаде относительно вектора поляризации $\mathbf{P} \equiv \langle \sigma \rangle_B$ распадающейся частицы В. Существование такой корреляции между направлениями аксиального $\langle \sigma \rangle_B$ и полярного \mathbf{p} векторов, инвариантной относительно отражения координат, как раз и является проявлением несохранения четности в рассматриваемом процессе¹⁴).

5.34. а) Так как момент системы $J = 0$, то спин-угловая часть в. ф. конечного состояния имеет вид

$$\Psi_{J=0} = \sum_{m=-j}^j C_{jm, j-m}^{00} Y_{j, -m}(\mathbf{n}) \chi_m \equiv \sum_m c(\mathbf{n}, m) \chi_m \quad (1)$$

(орбитальный момент относительного движения равен j — спину частицы В, \mathbf{p} — единичный вектор вдоль импульса относительного движения,

$$C_{jm, j-m}^{00} = (-1)^{j-m} (2j+1)^{-1/2}$$

— коэффициенты Клебша — Гордана (см. 3.39), χ_m — с. ф. оператора компоненты j_z спина частицы В). Величины $c(\mathbf{n}, m)$ при фиксированном \mathbf{n} можно рассматривать как спиновую в. ф. частицы В в j_z -представлении, так что матрица плотности имеет вид

$$\begin{aligned} \rho_{mm'} &= N c(\mathbf{n}, m) c^*(\mathbf{n}, m') = \\ &= \frac{4\pi}{2j+1} (-1)^{m-m'} Y_{j, -m}(\mathbf{n}) Y_{j, -m'}^*(\mathbf{n}) \quad (2) \end{aligned}$$

($N = 4\pi$ — нормировочный коэффициент). Отметим, что при фиксированном \mathbf{n} спиновое состояние частицы В является чистым, так как при этом $\hat{\rho} = \hat{\rho}$. Если же усреднить $\rho_{mm'}$ по всем направлениям \mathbf{p} вылета распадных частиц, то с учетом ортогональности шаровых функций получается естественный результат $\bar{\rho}_{mm'} = \delta_{mm'}/(2j+1)$, что описывает матрицу плотности полностью неполяризованного состояния.

б) Чтобы перейти к этому случаю (см. условие задачи), следует, очевидно, в (2) считать \mathbf{p} направленным вдоль оси z . Так

¹⁴) Заметим, что примерами распадов такого типа, идущих с несохранением четности, являются распады гиперонов на нуклон и пион, например, $\Lambda^0 \rightarrow p\pi^-$. Читателю предлагается самостоятельно показать, что в таких распадах неполяризованных частиц у нуклона возникает поляризация, равная

$$\mathbf{P} = 2 (\operatorname{Re} ab^*) \mathbf{n} / (|a|^2 + |b|^2).$$

как

$$|Y_{lm}(\theta=0)| = \sqrt{(2l+1)/4\pi} \delta_{m,0}$$

то теперь находим

$$\rho_{mm'} = \delta_{m,0} \delta_{m',0}$$

Этот результат имеет наглядный смысл. Он означает, что проекция спина частицы на направление \mathbf{n} имеет определенное, равное нулю значение. Это непосредственно следует из сохранения момента: в условиях задачи ($J=0$) проекция \mathbf{J} на любое направление равна нулю, а так как проекция орбитального момента на направление \mathbf{n} всегда равна нулю, то, следовательно, и проекция спина на это направление также равна нулю.

5.35. Проекция спина частицы B на ось z , направленную вдоль вектора $\mathbf{n}_0 = \mathbf{p}_a/p_a$, равна нулю. Соответственно в системе покоя этой частицы распадные частицы b и c имеют орбитальный момент $l=j$ и его проекцию $l_z=0$ и их угловое распределение описывается выражением

$$\frac{d\omega}{d\Omega_{\mathbf{n}}} = |Y_{l0}(\mathbf{n})|^2 = \frac{2j+1}{4\pi} P_j^2(\mathbf{n}\mathbf{n}_0)$$

(такое же распределение следует из результата 5.32, если для матрицы плотности $\rho_{mm'}$ воспользоваться ее видом, установленным в пункте б) предыдущей задачи). Так как $|P_l(\cos\theta)| \leq 1$ и $|P_l(\pm 1)| = 1$, то частицы в распаде $B \rightarrow b + c$ вылетают преимущественно вдоль (по или против) импульса частицы a (при $j \neq 0$).

5.36. Спиновые матрицы плотности имеют вид

$$\hat{\rho}^{(a,b)} = \frac{1}{2} (1 + \mathbf{P}_{a,b} \hat{\sigma})$$

(они описывают спиновое состояние одной из частиц в случае, когда проведено усреднение по спиновому состоянию другой). В силу сферической симметрии рассматриваемого состояния ($J=0$) векторы поляризации $\mathbf{P}_{a,b} = \xi_{a,b} \mathbf{n}$ определяются единственным вектором \mathbf{n} . Такое соотношение между аксиальным \mathbf{P} и полярным \mathbf{n} векторами, инвариантное по отношению к инверсии координат, может иметь место лишь при несохранении четности в распаде. Если четность сохраняется, то $\xi_{a,b} = 0$ и спиновое состояние каждой из частиц является полностью неполяризованным.

При несохранении четности в распаде, вообще говоря, $\xi_{a,b} \neq 0$, но между ними существует соотношение $\xi_a = -\xi_b$. Действительно, так как $J=0$, то проекция J_i на любое

направление равно нулю. Рассмотрим теперь среднее значение проекции полного момента

$$\bar{J}_n = \bar{s}_n^{(a)} + \bar{s}_n^{(b)} + \bar{l}_n = 0$$

на направление n . Так как $\hat{l}_n \equiv 0$, то $\bar{s}_n^{(a)} = -\bar{s}_n^{(b)}$ и соответственно $\mathbf{P}_a = -\mathbf{P}_b$ (так как $\mathbf{P} = 2\mathbf{s}$).

Примером рассматриваемого распада, идущего с несохранением четности, является $\pi_{\mu 2}$ -распад: $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu$. В этом распаде мюон и нейтрино полностью поляризованы, $P = 1$, антипараллельно своим импульсам.

Г л а в а 6

ИЗМЕНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВО ВРЕМЕНИ

6.1. Стационарные состояния этих систем были рассмотрены в 2.1, 3.1 и 3.2. Воспользовавшись (VI. 2), находим:

$$1) \Psi(x, t) = \frac{A}{4} e^{-i\omega t} \left(3 \sin \frac{\pi x}{a} - e^{-8i\omega t} \sin \frac{3\pi x}{a} \right),$$

$$\omega = \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2},$$

$$2) \Psi(\varphi, t) = \frac{A}{2} [1 - \exp(-2i\hbar t/l) \cdot \cos 2\varphi],$$

$$3) \Psi(\theta, t) = \frac{A}{3} [1 + \exp(-3i\hbar t/l) \cdot (3 \cos^2 \theta - 1)]$$

(для определения коэффициентов разложения в. ф. Ψ_0 по с. ф. гамильтониана удобно воспользоваться известными тригонометрическими формулами, не прибегая к (VI. 3)).

Через время T , равное: 1) $ma^2/2\pi\hbar$, 2) $\pi l/\hbar$, 3) $2\pi l/3\hbar$, рассматриваемые системы возвращаются в исходные состояния (читателю предлагается самостоятельно обсудить вопрос о периодичности «движения» квантовомеханических систем в общем случае).

6.2. Разложим в. ф. $\Psi_0(x)$ по с. ф. оператора импульса, являющимся также с. ф. гамильтониана свободной частицы:

$$\Psi_0(x) = \int c(p) \Psi_p(x) dp, \quad \Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}.$$

Используя значение интеграла Пуассона, находим

$$c(p) = \int \Psi_0(x) \Psi_p^*(x) dx = \frac{aA}{\sqrt{\hbar}} \exp \left[- (p - p_0)^2 a^2 / 2\hbar^2 \right]. \quad (1)$$

Теперь, воспользовавшись (VI. 2), получаем

$$\Psi(x, t) = \int c(p) \exp\left(-\frac{ip^2t}{2m\hbar}\right) \Psi_p(x) dp = A \left[1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right]^{-1/2} \times \\ \times \exp\left[\frac{-ma^2\hbar^2(x - v_0t)^2 + i\hbar^3x^2t + ia^4m^2v_0\hbar(2x - v_0t)}{2m(a^4\hbar^2 + t^2\hbar^4/m^2)}\right], \quad (2)$$

где $v_0 = p_0/m$. Отсюда $\langle a^2(t) \rangle = a^2(1 + \hbar^2t^2/m^2a^4)$

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{a|A|^2}{a(t)} \exp\left[-\frac{(x - v_0t)^2}{a^2(t)}\right]. \quad (3)$$

Выбрав $|A|^2 = (\pi a^2)^{-1/2}$ для нормировки в.ф. на единицу, находим

$$\overline{x(t)} = \int x |\Psi(x, t)|^2 dx = v_0t, \quad \overline{(\Delta x(t))^2} = a^2(1 + \hbar^2t^2/m^2a^4)/2. \quad (4)$$

Так как $c(p, t) = \exp(-ip^2t/2m\hbar)c(p)$ является в.ф. в импульсном представлении, то с учетом (1) находим

$$\overline{p(t)} = \int p |c(p, t)|^2 dp = p_0, \quad \overline{(\Delta p(t))^2} = \hbar^2/2a^2 \quad (5)$$

(независимость импульсных характеристик от времени связана с тем, что для свободной частицы импульс — интеграл движения).

Результаты (3)—(5) имеют простой смысл: распределение по координатам (3) — гауссовский пакет, центр которого $\overline{x(t)}$ перемещается со скоростью v_0 (равной $\overline{p}/m = \overline{v}$); при этом ширина пакета $\sim \sqrt{\overline{(\Delta x(t))^2}}$ увеличивается (пакет расплывается). Расплывание пакета связано с тем, что импульс (скорость) частицы не имеет определенного значения.

Ширина пакета увеличивается вдвое за время $t_0 = \sqrt{3} ma^2/\hbar$. Приведем числовую оценку t_0 в двух случаях. 1) Для микроскопической частицы с массой $m = 10^{-27}$ г (электрон) при $a = 10^{-8}$ см (атомные размеры) имеем $t_0 \sim 10^{-16}$ с. 2) Для малой, но уже макроскопической частицы с $m = 10^{-6}$ г при $a = 10^{-2}$ см находим $t_0 \sim 10^{17}$ с $\sim 10^{10}$ лет. Подчеркнем, что особенно быстрое расплывание пакета с первоначально «узкой» локализацией $\Delta x(0)$ связано с соотношением неопределенности $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$ (и так как расплывание определяется неопределенностью Δv скорости, то оно особенно ярко проявляется при уменьшении массы частицы). Как видно из (4), ширина пакета удовлетворяет соотношению $\overline{(\Delta x(t))^2} \geq (\hbar t/ma)^2$.

6.3. В произвольный момент времени

$$\Psi(x, t) = \int c(E) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \Psi_E(x) dE, \quad (1)$$

и убывание $|\Psi(x, t)|^2$ при $t \rightarrow \infty$ представляется очевидным: ввиду быстрой осцилляции подынтегральной функции (ее вещественной и мнимой частей) происходит взаимная компенсация вкладов соседних областей интегрирования. Убывание $|\Psi(x, t)|^2$ означает, что частица при $t \rightarrow \infty$ уходит на бесконечно большое расстояние. Это соответствует инфинитному характеру движения в классической механике. Отметим, что одновременно с уменьшением плотности вероятности увеличивается ширина пакета — он расплывается, что и обеспечивает сохранение нормировки в. ф. (в качестве иллюстрации см. (3) из 6.2).

6.4. Разложив $\tilde{\Psi}_0$ по с. ф. гамильтониана, имеем

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar}\right) c_0 \Psi_0(x) + \int_0^{\infty} c(E) \exp(-iEt/\hbar) \Psi_E(x) dE, \quad (1)$$

где

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0} \exp(-\kappa_0 |x|), \quad E_0 = -\hbar^2 \kappa_0^2 / 2m, \quad \kappa_0 = m\alpha / \hbar^2$$

представляют в. ф. и энергию единственного состояния д. с. в δ -яме, см. 2.7.

Второе слагаемое в (1) — вклад непрерывного спектра — при $t \rightarrow \infty$ обращается в нуль (сравнить с 6.3), так что

$$|\Psi(x, t = \infty)|^2 = |c_0 \Psi_0(x)|^2 = \kappa_0 |c_0|^2 \exp(-2\kappa_0 |x|). \quad (2)$$

Выбрав $A = \sqrt{\beta}$ для нормировки в. ф. $\tilde{\Psi}_0$ на 1 и вычислив

$$c_0 = \int \tilde{\Psi}_0(x) \Psi_0^*(x) dx = 2 \sqrt{\kappa_0 \beta} (\kappa_0 + \beta)^{-1},$$

перепишем выражение (2) в виде

$$W(x) \equiv |\Psi(x, t = \infty)|^2 = \frac{4\beta \kappa_0^2}{(\beta + \kappa_0)^2} e^{-2\kappa_0 |x|}, \quad (3)$$

определяющем распределение по координатам частицы при $t \rightarrow \infty$. Оно нормировано на значение

$$w \equiv \int_{-\infty}^{\infty} W(x) dx = 4\beta \kappa_0 (\beta + \kappa_0)^{-2} \leq 1, \quad (4)$$

отличие которого от 1 означает, что частица с конечной вероятностью, равной $(1 - w)$, уходит на бесконечность. Для пояснения полученного результата отметим, что в общем случае

$$\int \lim_{t \rightarrow \infty} |\Psi(x, t)|^2 dx \neq \lim_{t \rightarrow \infty} \int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

6.5. В. ф. имеет вид

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2 t}{2m} - px \right) \right] \Phi_0(p) dp. \quad (1)$$

При $t \rightarrow \infty$ (и $x \rightarrow \pm\infty$) фаза в показателе экспоненты сильно изменяется уже при небольшом изменении переменной p , что приводит к быстрым осцилляциям и к взаимному сокращению вкладов от соседних областей интегрирования. Наименее скомпенсированным (а поэтому и доминирующим) является вклад тех областей интегрирования, в которых фаза как функция p имеет экстремум и изменяется наиболее медленно. Экстремальная точка $p_0 = mx/t$. Вынося из-под знака интеграла значение «плавной» функции $\Phi_0(p_0)$ в этой точке, находим искомый асимптотический вид в. ф. при $t \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &\approx \frac{\Phi_0(mx/t)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2 t}{2m} - px \right) \right] dp = \\ &= \sqrt{m/it} \Phi_0(mx/t) \exp(imx^2/2\hbar t) \end{aligned} \quad (2)$$

(очевидно, что она, как и $\Phi_0(p)$, нормирована на 1).

Отметим наглядный смысл результата (2): значение в. ф. при $t \rightarrow \infty$ в точке $x \rightarrow \pm\infty$ (так, что $x/t = \text{const} \equiv v_0 = p_0/m$) определяется в. ф. $\Phi_0(p)$ при $p = p_0$, т. е. именно при таком импульсе, который должна иметь свободная частица в классической механике, чтобы за время t сместиться на расстояние x . При этом выражение под знаком экспоненты в (2) есть $iS(x, t)/\hbar$, где S — действие для такой частицы.

6.6. Функция Грина по переменным x, t удовлетворяет у. Ш. для свободной частицы и граничному условию $G(x = 0, t; x', t') = 0$. Имея в виду (VI.7), нетрудно сообразить (по аналогии с методом изображений в электростатике), что

$$\begin{aligned} G(x, t; x', t') &= \\ &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t')}} \left\{ \exp \frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')} - \exp \frac{im(x+x')^2}{2\hbar(t-t')} \right\}. \end{aligned}$$

Подставив это выражение и Ψ_0 из условия задачи в (VI.5) и вычислив получающийся интеграл, находим

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= A \sqrt{\frac{ma^2}{ma^2 + i\hbar t}} \left\{ \exp \left[\frac{1}{2(1 + \hbar^2 t^2/m^2 a^4)} \frac{1}{a^2} \times \right. \right. \\ &\times \left. \left. \left(-(x+x_0 - p_0 t/m)^2 + i\hbar t(x+x_0)^2/m^2 + 2ip_0 a^2(x+x_0)/\hbar - \right. \right. \right. \\ &\left. \left. \left. - ip_0^2 a^2 t/m\hbar - 2ip_0 x_0(a^2 + \hbar^2 t^2/m^2 a^2)/\hbar \right) \right] - \exp[(x \rightarrow -x)] \right\}, \quad (1) \end{aligned}$$

где $\exp[(x \rightarrow -x)]$ означает выражение, получающееся из первого экспоненциального слагаемого заменой в нем x на $-x$.

В. ф. (1) представляет суперпозицию двух волновых пакетов, первый из которых описывает падающие на стенку частицы, а второй — отраженные. В начальные моменты времени в (1) наиболее существенным является первое слагаемое, а при $t > > mx_0/\rho_0$ в случае ¹⁾ $\rho_0 \gg \hbar/a$, наоборот, доминирующим является второе слагаемое.

6.7. Сначала рассмотрим нормированный на 1 волновой пакет для свободной частицы, в котором представлены с одинаковой амплитудой импульсы $p = \hbar k$ из интервала $(k_0 - \kappa_0, k_0 + \kappa_0)$:

$$\Psi_{\text{своб}}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\kappa_0}^{\kappa_0} \exp \left[i(k_0 + \kappa)x - \frac{i\hbar t}{2m}(k_0 + \kappa)^2 \right] \frac{d\kappa}{\sqrt{2\kappa_0}}. \quad (1)$$

При значении $\kappa_0 \ll k_0$ и для моментов времени таких, что $|t| \ll \ll T = m/\hbar\kappa_0^2$, под знаком экспоненты можно опустить член $\propto \kappa^2$ и найти

$$\Psi_{\text{своб}}(x, t) \approx \sqrt{\frac{a}{\pi}} \exp(ik_0x - i\hbar k_0^2 t/2m) \frac{\sin[(x - v_0 t)/a]}{x - v_0 t}, \quad (2)$$

здесь $v_0 = \hbar k_0/m$, $a = 1/\kappa_0$. Согласно (2) $|\Psi_{\text{своб}}(x, t)|^2$ описывает волновой пакет, центр которого движется со скоростью v_0 (находясь в точке $x = 0$ при $t = 0$); ширина пакета $\Delta x = |x - v_0 t| \sim a$, причем он не расплывается (в течение лишь рассматриваемого времени!).

Переходя к рассмотрению отражения пакета от «ступеньки», приведем с. ф. гамильтониана для $E = \hbar^2 k^2/2m < U_0$ при $x < 0$:

$$\Psi_k^+(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (e^{ikx} - e^{i\varphi(k)} e^{-ikx}), \quad (3)$$

¹⁾ Отметим, что именно в случае $\rho_0 \gg \hbar/a$ и имеет смысл характеризовать исходный волновой пакет как описывающий падающую на стенку частицу. В противном случае (при $\rho_0 \leq \hbar/a$) уже в исходном состоянии частица с заметной вероятностью (~ 1) имеет отрицательное значение импульса (сравнить с 1.37), как и отраженная частица; соответственно характеризовать первое слагаемое в (1) как отвечающее падающим на стенку частицам буквально лишено смысла. Отмеченное различие между случаями $\rho_0 \gg \hbar/a$ и $\rho_0 \leq \hbar/a$ проявляется в том, что при $\rho_0 \leq \hbar/a$ первое слагаемое в (1) не является пренебрежимо малым по сравнению со вторым даже при $t \rightarrow \infty$.

где

$$\varphi(k) = 2 \operatorname{arctg} \sqrt{E/(U_0 - E)}$$

(это следует из сшивания (3) с в. ф.

$$\Psi_k^+ = A \exp \left[-\sqrt{2m(U_0 - E)} x/\hbar \right]$$

при $x > 0$). Составим теперь из функций (3) волновой пакет $\Psi(x, t)$ таким же образом, как и в (1). В результате в. ф. частицы (уже с учетом наличия потенциальной ступеньки) при $x \leq 0$ запишется в виде

$$\Psi(x, t) = \Psi_{\text{пад}}(x, t) + \Psi_{\text{отр}}(x, t). \quad (4)$$

Здесь $\Psi_{\text{пад}}$ — часть пакета, связанная с первым слагаемым в (3), совпадает с (1) и (2) и описывает частицу, движущуюся к барьеру; она отлична от нуля (напомним: $x \leq 0$) лишь при $t \leq a/v_0$, пока весь падающий пакет не достигает ступеньки. Вторая часть пакета, $\Psi_{\text{отр}}$, соответствует частице, отраженной от ступеньки (она фактически отлична от нуля лишь при $t > 0$). Если при интегрировании по k пренебречь изменением фазы $\varphi(k)$ отраженной волны, т. е. положить $\varphi(k) \approx \varphi(k_0)$, то для $\Psi_{\text{отр}}$ придем к явному выражению, получающемуся из (2) заменой x на $-x$ и умножением на $-e^{i\varphi(k_0)}$. В этом приближении эффект задержки частицы при отражении отсутствует. Для уточнения результата выполним разложение: $\varphi(k_0 + \kappa) \approx \varphi(k_0) + \varphi'(k_0)\kappa$. Теперь получаем²⁾

$$\Psi_{\text{отр}}(x, t) \approx -\sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{i\alpha(x, t)} \frac{\sin [(x - \varphi'(k_0) + v_0 t)/a]}{x - \varphi'(k_0) + v_0 t}. \quad (5)$$

Отсюда следует выражение для времени задержки ($E_0 = p_0^2/2m$)

$$\tau = \varphi'(k_0)/v_0 = \hbar/\sqrt{E_0(U_0 - E_0)}. \quad (6)$$

Так как $\tau > 0$, то при отражении частиц от барьера действительно просходит их задержка. Это можно понять, если иметь в виду, что, в отличие от классической механики, частица проникает и под барьер³⁾. При этом естественным является уменьшение τ с увеличением U_0 , так что $\tau = 0$ при $U_0 = \infty$. В заключение отметим, что $\tau \ll a/v_0$, т. е. время задержки мало по сравнению со временем пролета частицей расстояния порядка ширины пакета.

²⁾ Очевидное значение фазы $\alpha(x, t)$ мы не указываем.

³⁾ При этом $\tau \sim \delta x/v_0$, где $\delta x \sim \hbar/\sqrt{m(U_0 - E_0)}$ — расстояние, на которое проникает частица в глубь барьера.

6.8. С. ф. гамилтониана, соответствующие падающим слева частицам, вне области действия потенциала имеют вид

$$\Psi_k^+(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (e^{ikx} + A(k) e^{-ikx}), & x < -d, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} B(k) e^{ikx}, & x > d, \end{cases} \quad (1)$$

где $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, d — радиус потенциала, так что можно считать $U = 0$ при $|x| > d$. Рассмотрим нормированный на 1 волновой пакет (сравнить с предыдущей задачей)

$$\Psi(x, t) = \int_{-\kappa_0}^{\kappa_0} \Psi_{k_0+\kappa}^+(x) \exp\left[-\frac{i\hbar t}{2m} (k_0 + \kappa)^2\right] \frac{d\kappa}{\sqrt{2\kappa_0}}. \quad (2)$$

При значениях $\kappa_0 \ll k_0$, причем настолько малых, что можно считать

$$A(k_0 \pm \kappa_0) \approx A(k_0) \quad \text{и} \quad B(k_0 \pm \kappa_0) \approx B(k_0),$$

а также пренебречь членом $\propto \kappa^2$ в показателе экспоненты (при $|t| \ll T = m/\hbar\kappa_0^2$), в. ф. вне области действия потенциала с учетом асимптотик (1) принимает вид

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \Psi_{\text{пад}}(x, t) + \Psi_{\text{отр}}(x, t), & x < -d, \\ \Psi(x, t) &= \Psi_{\text{прош}}(x, t), & x > d, \end{aligned} \quad (3)$$

где ⁴⁾

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{пад}}(x, t) &\approx \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{i\alpha(x, t)} \frac{\sin[(x - v_0 t)/a]}{x - v_0 t}, \\ \Psi_{\text{отр}}(x, t) &\approx \sqrt{\frac{a}{\pi}} A(k_0) e^{i\alpha(-x, t)} \frac{\sin[(x + v_0 t)/a]}{x + v_0 t}, \\ \Psi_{\text{прош}}(x, t) &= \sqrt{\frac{a}{\pi}} B(k_0) e^{i\alpha(x, t)} \frac{\sin[(x - v_0 t)/a]}{x - v_0 t}, \end{aligned} \quad (4)$$

а $v_0 = \hbar k_0/m$, $a = 1/\kappa_0$.

Интерпретация выражений (3), (4) представляется очевидной. При $t < -d/v_0$ существенно отлична от нуля лишь часть в. ф. $\Psi_{\text{пад}}$, описывающая падающий пакет, еще не достигший области $|x| \leq d$ действия потенциала. При $t > d/v_0$, наоборот, отличны от нуля лишь части $\Psi_{\text{отр}}$ и $\Psi_{\text{прош}}$, описывающие частицу, вылетающую из области действия потенциала. При этом

⁴⁾ Здесь фаза $\alpha(x, t) = k_0 x - \hbar k_0^2 t/2m$, см. формулу (2) из предыдущей задачи.

вероятности нахождения частицы в отраженном и прошедшем волновых пакетах равны соответственно $R = |A(k_0)|^2$ и $D = |B(k_0)|^2$ — в согласии со смыслом этих величин в стационарном подходе.

6.9. В. ф. системы будем описывать двухкомпонентным столбцом $\Psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix}$, где $\psi_{1,2}$ — амплитуды 1-го и 2-го собственных состояний невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 , причем

в отсутствие возмущения $\psi_{1,2} = C_{1,2} \exp(-i\varepsilon_{1,2}^{(0)}t/\hbar)$. При воздействии на систему внешнего поля ее новые стационарные состояния (их энергии и в. ф.) определяются из решения у. Ш.

$(\hat{H}_0 + V)\Psi_\varepsilon = \varepsilon\Psi_\varepsilon$, которое сводится к системе двух алгебраических уравнений для $\Psi_\varepsilon = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$:

$$(\varepsilon_1^{(0)} + V_{11} - \varepsilon)a_1 + V_{12}a_2 = 0, \quad V_{21}a_1 + (\varepsilon_2^{(0)} + V_{22} - \varepsilon)a_2 = 0.$$

Решение ее дает «возмущенные» уровни $\varepsilon_{1,2}$ и с. ф.:

$$\varepsilon_{1,2} = \left[\varepsilon_1^{(0)} + \varepsilon_2^{(0)} + V_{11} + V_{22} \mp \sqrt{(\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_2^{(0)} + V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \right] / 2, \quad (1)$$

$$\Psi_{\varepsilon_1} = N \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\varepsilon_2} = N \begin{pmatrix} -b^* \\ 1 \end{pmatrix}; \quad b = (\varepsilon_1 - \varepsilon_1^{(0)} - V_{11})/V_{12}, \quad N = (1 + |b|^2)^{-1/2}$$

(с. ф. $\Psi_{\varepsilon_{1,2}}$, как и следует, взаимно ортогональны).

В. ф. системы при $t > 0$ имеет вид

$$\Psi(t) = c_1 \Psi_{\varepsilon_1} e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} + c_2 \Psi_{\varepsilon_2} e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar},$$

где значения $c_{1,2}$ определяются начальными условиями. В рассматриваемом случае, $\Psi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, находим

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + |b|^2} \begin{pmatrix} e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} + |b|^2 e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar} \\ b(e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} - e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar}) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

и вероятность перехода системы в другое (2-е) состояние невозмущенного гамильтониана

$$\omega_2(t) = |\psi_2(t)|^2 = \frac{4|b|^2}{(1 + |b|^2)^2} \sin^2 \left[\frac{1}{2\hbar} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) t \right]. \quad (3)$$

Ее величина осциллирует между 0 и $\omega_{\max} = 4|b|^2(1 + |b|^2)^{-2}$. Значение ω_{\max} может быть близким к 1, если матричный элемент V_{12} является достаточно большим. Такая ситуация

реализуется, например, в случае⁵⁾ $\mathbf{e}_1^{(0)} = \mathbf{e}_2^{(0)}$ (вырожденные уровни) при $V_{11} = V_{22} = 0$. Как видно из (1), при этом в стационарных состояниях возмущенной системы исходные состояния представлены с одинаковой, равной $1/2$, вероятностью.

6.10. Имея в виду гамильтониан (VII. 1), по формуле (VI. 4) находим⁶⁾

$$\hat{\mathbf{v}} \equiv \hat{\mathbf{r}} = (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)/\mu, \quad (1)$$

$$\hat{\mathbf{w}} \equiv \hat{\mathbf{v}} = \partial\hat{\mathbf{v}}/\partial t + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{v}}] = \frac{e}{\mu} \mathcal{E} + \frac{e}{2\mu c} ([\hat{\mathbf{v}}\mathcal{H}] - [\mathcal{H}\hat{\mathbf{v}}]), \quad (2)$$

где $\mathcal{E} = -\nabla\phi - \partial\mathbf{A}/c \partial t$, $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}$, что представляет естественное квантовомеханическое обобщение соответствующих выражений классической теории (при этом правая часть (2) определяет оператор силы Лоренца $\hat{\mathbf{F}}_{\text{Лор}}$).

6.11. Как и в предыдущей задаче, находим

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{v}} &= \hat{\mathbf{p}}/\mu, & \hat{\mathbf{w}} &= (\mu_0/\mu s) \text{grad } (\hat{\mathbf{s}}\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)), \\ \hat{\mathbf{s}} &= (i/\hbar) [\hat{H}, \hat{\mathbf{s}}] & &= (\mu_0/\hbar s) [\hat{\mathbf{s}}\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)] \end{aligned}$$

(сравнить с соответствующими классическими выражениями для нейтральной частицы, имеющей магнитный момент $\boldsymbol{\mu}$ и собственный механический момент $\mathbf{M} = \boldsymbol{\mu}$, взаимодействие которой с электромагнитным полем описывается потенциалом $U = -\boldsymbol{\mu}\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$; при этом $d\mathbf{M}/dt = \mathbf{L}_{\text{вп}} = [\boldsymbol{\mu}\mathcal{H}]$).

6.12. Усредняя оператор \hat{f} , находим

$$\bar{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n d\tau = \frac{i}{\hbar} \int \Psi_n^* (\hat{H} \hat{f} - \hat{f} \hat{H}) \Psi_n d\tau = 0 \quad (1)$$

(здесь учтено, что $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$ и под интегралом $\Psi_n^* \hat{H} \dots = (\hat{H}\Psi_n)^* \dots$ ввиду эрмитовости \hat{H}).

Учитывая, что $d\hat{\mathbf{r}}/dt = \hat{\mathbf{p}}/m$ и $d\hat{\mathbf{p}}/dt = -\text{grad } U$, имеем

$$d(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})/dt = \hat{\mathbf{p}}\hat{\dot{\mathbf{r}}} + \hat{\mathbf{p}}\hat{\dot{\mathbf{r}}} = 2\hat{T} - \mathbf{v}\hat{U} \quad (2)$$

и согласно (1) для средних значений получаем $T_{nn} = \mathbf{v}\bar{U}_{nn}/2$, что и представляет квантовомеханическое обобщение теоремы вириала классической механики (в которой усреднение проводится по

⁵⁾ Отметим почти вырожденные $2s$ - и $2p$ -состояния атома водорода, значительные переходы между которыми возникают уже в сравнительно слабом электрическом поле. Это, в свою очередь, приводит к существенному влиянию электрического поля на время жизни метастабильного $2s$ -состояния, см. 11.62.

⁶⁾ Не путать векторное произведение с коммутатором!

времени). Отметим, что полученное соотношение справедливо и для системы из произвольного числа частиц, если взаимодействие их друг с другом и с внешним полем описывается степенными потенциалами с одинаковым показателем ν .

Приведем еще один вывод теоремы вириала, основанный на использовании соотношения (1.6). Для этого заметим, что степенной потенциал $U = \pm \alpha r^\nu$ характеризуется только одним размерным параметром α . Так как из трех размерных параметров \hbar , m , α можно лишь единственным способом составить комбинацию, имеющую размерность энергии, $\epsilon_0 = \alpha (\hbar^2/m\alpha)^{\nu/(\nu+2)}$ и нельзя образовать ни одного безразмерного параметра, то для с.з. гамильтониана $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\Delta + U$, относящихся к д.с., из соображений размерности следует $E_n = C(n, \nu)\epsilon_0$. Замечая, что $U \equiv \alpha \partial \hat{H} / \partial \alpha$, согласно (1.6) получаем

$$\bar{U}_{nn} = \alpha \partial E_n / \partial \alpha = 2E_n / (\nu + 2).$$

Из этого соотношения и равенства $E_n = \bar{T}_{nn} + \bar{U}_{nn}$ непосредственно следует утверждение теоремы вириала.

6.13. Усредняя соотношения $[\hat{p}_{ai}, \hat{x}_{bk}] = -i\hbar \delta_{ab} \delta_{ik}$ и $d\hat{x}_{ai}\hat{x}_{bk}/dt = (i/\hbar\mu)(\hat{p}_{ai}\hat{x}_{bk} + \hat{x}_{ai}\hat{p}_{bk})$ (индексы a, b нумеруют частицы) по состоянию д.с. с в.ф. Ψ_n с учетом равенства нулю второго среднего, находим при $i = k$ (без суммирования!)

$$\sum_m \{ \langle n | \hat{x}_{ai} | m \rangle \langle m | \hat{p}_{bi} | n \rangle + \langle n | \hat{x}_{bi} | m \rangle \langle m | \hat{p}_{ai} | n \rangle \} = i\hbar \delta_{ab} \quad (1)$$

(здесь использовано условие *полноты* $\sum_m |m\rangle \langle m| = 1$). Учтем

теперь, что $\hat{p}_a = (i\mu/\hbar) [\hat{H}, \hat{r}_a]$, и поэтому

$$\langle m | \hat{p}_{ai} | n \rangle = (i\mu/\hbar) (E_m - E_n) \langle m | \hat{x}_{ai} | n \rangle. \quad (2)$$

Так как $\hat{d} = e \sum_a \hat{r}_a$, то после умножения (1) на e^2 , подстановки

в него (2) и выполнения суммирования по a и b (по всем частицам) приходим к приведенному в условии задачи правилу сумм.

6.14. Из условия неизменности гамильтониана следует $\partial \hat{H} - \hat{H} \hat{U} = 0$, и если записать унитарный оператор в виде $\hat{U} = \exp(i\hat{F})$, где \hat{F} — уже эрмитов оператор, то, очевидно, и $[\hat{F}, \hat{H}] = 0$. Соответственно если $\partial \hat{F} / \partial t = 0$, то \hat{F} является оператором сохраняющейся (во времени) величины — интеграла движения системы. Подчеркнем, что существование таких интегралов движения связано именно с симметрией взаимодействия (гамильтониана) — его неизменностью при соответствующем преобразовании координат системы — и не зависит от конкретного вида взаимодействия.

а) Оператор сдвига $\hat{O} = \exp(i\mathbf{a}\hat{\mathbf{P}}/\hbar)$, см. 1.7; его коммутативность с \hat{H} эквивалентна условию $[\hat{\mathbf{P}}, \hat{H}] = 0$, означающему сохранение импульса системы, $\hat{\mathbf{P}} = \sum_n \hat{\mathbf{p}}_n$.

б) Оператор вращения координат $\hat{U} = \exp(i\varphi_0\hat{\mathbf{J}})$, где $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ — оператор полного момента системы. Коммутативность \hat{O} с \hat{H} эквивалентна условию $[\hat{\mathbf{J}}, \hat{H}] = 0$, означающему сохранение полного момента системы (если же взаимодействие не зависит от спина, то инвариантность гамильтониана относительно вращения координат приводит к сохранению как орбитального, так и спинового моментов в отдельности).

в) Для преобразования отражения координат $\hat{O}\Psi(\mathbf{r}_n) \equiv \Psi(-\mathbf{r}_n)$ из коммутативности \hat{O} с \hat{H} следует сохранение четности.

Гамильтониан любой замкнутой системы частиц инвариантен относительно рассмотренных выше преобразований, что связано со свойствами свободного пространства: его однородностью, изотропией и эквивалентностью правого и левого (последняя инвариантность и соответственно закон сохранения четности нарушаются так называемыми *слабыми* взаимодействиями). Внешнее поле изменяет отмеченные свойства пространства. Соответственно гамильтониан системы во внешнем поле уже не обладает такой высокой степенью симметрии. Однако отдельные элементы симметрии и отвечающие им интегралы движения могут иметь место и в этом случае, см. следующие задачи.

6.15. Гамильтониан \hat{H}_0 системы в отсутствие внешнего поля имеет наиболее высокую симметрию: он инвариантен относительно произвольного сдвига, вращения и отражения координат. Внешнее поле нарушает эту симметрию, так что именно симметрия потенциальной энергии частиц во внешнем поле

$$U_{\text{внеш}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_n U_n(\mathbf{r}_n)$$

определяет симметрию гамильтониана системы $\hat{H} = \hat{H}_0 + U_{\text{внеш}}$ в целом.

В свою очередь симметрия $U_{\text{внеш}}$ однозначно определяется характером симметрии «источников» внешнего поля и для выявления ее следует позаботиться о выборе системы координат, адекватной симметрии системы (проявляющейся в независимости $U_{\text{внеш}}$ от соответствующих координат).

Имея в виду высказанные соображения, явный вид операторов проекций импульса и момента,

$$\hat{P}_z = -i\hbar \sum_n \partial/\partial z_n, \quad \hat{L}_z = -i \sum_n \partial/\partial \varphi_n,$$

а также сохранение энергии системы в случае $\partial U_{\text{внеш}}/\partial t = 0$, приходим к следующим заключениям об интегралах движения.

1) Интегралы движения: E, P, L, I . Так как для замкнутой системы движение центра масс и относительное движение независимы, то E, L, I сохраняются не только для системы в целом, но и для обоих указанных движений в отдельности.

2) Система трансляционно инвариантна в любом направлении, параллельном плоскости x, y , создающей внешнее поле, имеет азимутальную симметрию относительно любой оси z , перпендикулярной плоскости x, y , и зеркальную симметрию относительно этой плоскости; соответственно

$$U_{\text{внеш}} = \sum_n U_n(|z_n|).$$

Интегралы движения: E, P_x, P_y, L_z, I .

3) Система имеет центральную симметрию; интегралы движения: E, L, I .

4) Система обладает аксиальной симметрией относительно оси, проходящей через точки — источники внешнего поля; $U_{\text{внеш}} = \sum_n U_n(\rho_n, z_n)$ и интегралами движения являются E, L_z . В случае когда точки несут одинаковый заряд, имеем⁷⁾ $U_n = U_n(\rho_n, |z_n|)$ и поэтому сохраняется также и четность I .

5) Если направление сил, действующих на частицы, зависит от времени, то никаких механических интегралов движения у системы нет. Если же от времени зависят только величины сил (но не их направление, общее для всех частиц системы), то, выбрав ось z вдоль этого направления, имеем

$$U_{\text{внеш}} = - \sum_n F_n(t) z_n$$

и интегралы движения P_x, P_y, L_z (а при $F_n(t) = \text{const}$ также и интеграл энергии E).

6) Система обладает аксиальной симметрией относительно оси z , направленной вдоль провода, и трансляционно инвариантна в этом направлении, так что $U_{\text{внеш}} = \sum_n U_n(\rho_n)$ и интегралами движения являются E, P_z, L_z, I (сохранение четности I отражает зеркальную симметрию относительно плоскости, перпендикулярной оси z).

7) Ось винта — ось z , шаг винта — a , угол поворота вокруг оси — φ . Функция

$$U_{\text{внеш}} = \sum_n U_n(\rho_n, z_n, \varphi_n)$$

⁷⁾ Плоскость $z = 0$ проходит через середину отрезка, соединяющего точки.

инвариантна относительно преобразования $\varphi_n \rightarrow \varphi_n + \delta\alpha$, $z_n \rightarrow z_n + a\delta\alpha/2\pi$ при фиксированных значениях ρ_n : при этом $\delta U_{\text{внеш}} = 0$. Это означает, что оператор $U_{\text{внеш}}$, а потому и гамильтониан H , коммутирует с оператором

$$\sum_n \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_n} + \frac{a}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z_n} \right) = \frac{i}{\hbar} \left(\hbar \hat{L}_z + \frac{a}{2\pi} \hat{P}_z \right).$$

Следовательно, интегралом движения является комбинация

$$L_z + aP_z/2\pi\hbar,$$

а также, в силу $\partial U_{\text{внеш}}/\partial t = 0$, и энергия E .

6.16. В обоих случаях интегралами движения являются: энергия E , проекции полного момента $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ и соответственно j^2 , а в случае а) также четность I и I^2 .

Так как с. ф. гамильтониана можно выбрать также и с. ф. коммутирующих с ним и друг с другом операторов, то, очевидно, в. ф. стационарных состояний в случае а) имеют вид

$$\Psi_{Ejl_1,2} = f(r) \Psi_{jl_1,2},$$

где $\Psi_{jl_1,2}$ — известные спин-угловые в. ф. частицы со спином $s = 1/2$, см. 5.24, $l_{1,2} = j \pm 1/2$, при этом $I = (-1)^{l_{1,2}}$, а у. Ш. сводится к одномерному уравнению для функции $f(r)$.

В случае б) в. ф. стационарных состояний имеют вид

$$\Psi_{Ejl_z} = f_1(r) \Psi_{jl_1j_z} + f_2(r) \Psi_{jl_2j_z},$$

а у. Ш. сводится к системе двух линейных дифференциальных уравнений для функций f_1 и f_2 ; сравнить с 12.5.

6.17. Из условий $d\hat{f}_{1,2}/dt = 0$ следует $d(\hat{f}_1\hat{f}_2)/dt = 0$ и $d(\hat{f}_2\hat{f}_1)/dt = 0$, так что $\hat{f}_1\hat{f}_2$ и $\hat{f}_2\hat{f}_1$, как и указанные в условии задачи эрмитовы комбинации этих операторов (если $\hat{f}_{1,2}$ — эрмитовы), являются интегралами движения.

а) Так как $\hat{P}_y = i(\hat{P}_x\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{P}_x)$, см. (III. 2), то из сохранения P_x и J_z автоматически следует сохранение и P_y . Это легко объяснить. Действительно, сохранение P_x означает, что система обладает трансляционной инвариантностью вдоль оси x , а сохранение J_x свидетельствует о ее аксиальной симметрии относительно оси z . Наличие этих симметрий автоматически влечет за собой и трансляционную симметрию вдоль оси y (и в плоскости x, y вообще).

б) Интегралом движения является также и $\hat{J}_z = -i(\hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x)$. Сохранение J_x и J_y свидетельствует об аксиальной симметрии системы относительно осей x и y , что, в свою очередь, автоматически приводит к аксиальной симметрии также и от-

носителю любой другой оси, имеющей общую точку пересечения с указанными осями, и тем самым означает наличие у системы центральной симметрии.

6.18. Учитывая, что $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m - \mathbf{F}_0\mathbf{r}$, находим

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{G}} = \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathbf{G}} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{G}}] = -\mathbf{F}_0 - \frac{i}{\hbar} [(\mathbf{F}_0, \mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = 0,$$

так что среднее значение

$$\overline{\hat{\mathbf{G}}} = \overline{\mathbf{p}(t)} - \mathbf{F}_0 t = \text{const.}$$

Это является естественным квантовомеханическим обобщением результата классической механики, согласно которой при движении в однородном поле вектор $\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}(t) - \mathbf{F}_0 t$ (так как $\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(0) + \mathbf{F}_0 t/m$) является интегралом движения и равен импульсу частицы при $t = 0$.

6.19. Введем сначала оператор $\hat{f}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda\hat{A}}$. Дифференцирование его по параметру λ дает

$$\frac{d\hat{f}}{d\lambda} = \hat{A} e^{\lambda\hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda\hat{A}} - e^{\lambda\hat{A}} \hat{B} \hat{A} e^{-\lambda\hat{A}} = e^{\lambda\hat{A}} [\hat{A}, \hat{B}] e^{-\lambda\hat{A}}.$$

Аналогично находим производные второго и более высоких порядков: $\hat{f}''(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] e^{-\lambda\hat{A}}$ и т. д. Воспользовавшись теперь разложением в ряд Тейлора, приходим к искомому соотношению:

$$\begin{aligned} e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{f}(\lambda=1) &= \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{d^n \hat{f}}{d\lambda^n} \right)_{\lambda=0} = \\ &= \hat{B} + \frac{1}{1!} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \end{aligned}$$

6.20. Вид гейзенберговских операторов координаты и импульса согласно (VI.9) легко установить, если воспользоваться результатом предыдущей задачи. При определении же вида этих операторов вторым способом следует учесть, что из-за линейности системы уравнений (в данной задаче) ее можно решать так же, как для обычных, неоператорных функций, так как при этом не возникает осложнений, связанных с некоммутативностью операторов. Приведем ответ:

а) для свободной частицы

$$\hat{x}(t) = \hat{x} + (t/m) \hat{p}, \quad \hat{p}(t) = \hat{p};$$

б) для частицы в однородном поле

$$\hat{x}(t) = \hat{x} + \frac{t}{m} \hat{p} + \frac{F_0 t^2}{2m}, \quad \hat{p}(t) = \hat{p} + \frac{F_0 t}{m};$$

в) для линейного осциллятора

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

Здесь \hat{x} , \hat{p} — обычные шрёдингеровские операторы, с которыми гейзенберговские операторы совпадают при $t = 0$.

Покажем, как определяется вид гейзенберговских операторов из уравнений движения на примере осциллятора. Для него

$$\hat{H} = \hat{p}^2(t)/2m + k\hat{x}^2(t)/2.$$

С учетом значения коммутатора $[\hat{p}(t), \hat{x}(t)] = -i\hbar$ уравнения движения принимают вид

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}(t)] = \frac{\hat{p}(t)}{m}, \quad \frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}(t)] = -k\hat{x}(t).$$

Решение этой системы уравнений дает ($\omega = \sqrt{k/m}$):

$$\hat{x}(t) = \hat{C}_1 \cos \omega t + \hat{C}_2 \sin \omega t, \quad \hat{p}(t) = -m\omega [\hat{C}_1 \sin \omega t - \hat{C}_2 \cos \omega t],$$

а из условия совпадения при $t = 0$ гейзенберговских и шрёдингеровских операторов следует $\hat{C}_1 = \hat{x}$, $\hat{C}_2 = \hat{p}/m\omega$.

6.21. Временная зависимость средних значений физических величин полностью определяется зависимостью от времени соответствующих гейзенберговских операторов. Учитывая значения следующих средних в рассматриваемом состоянии:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= x_0, & \overline{\hat{x}^2} &= x_0^2 + a^2/2, & \bar{p} &= p_0, \\ \overline{\hat{p}^2} &= p_0^2 + \hbar^2/2a^2, & \overline{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}} &= 2x_0p_0, \end{aligned}$$

находим, воспользовавшись результатами из 6.20:

а) для свободной частицы

$$\begin{aligned} \overline{x(t)} &= \overline{\hat{x}(t)} = x_0 + p_0 t/m, & \overline{p(t)} &= p_0, \\ \overline{(\Delta x(t))^2} &= a^2 (1 + \hbar^2 t^2/m^2 a^4)/2, & \overline{(\Delta p(t))^2} &= \hbar^2/2a^2; \end{aligned}$$

б) для частицы в однородном поле

$$\begin{aligned} \overline{x(t)} &= x_0 + p_0 t/m + F_0 t^2/2m, & \overline{p(t)} &= p_0 + F_0 t/m, \\ \overline{(\Delta x(t))^2} &= a^2 (1 + \hbar^2 t^2/m^2 a^4)/2, & \overline{(\Delta p(t))^2} &= \hbar^2/2a^2; \end{aligned}$$

в) для осциллятора

$$\begin{aligned} \overline{x(t)} &= x_0 \cos \omega t + (p_0/m\omega) \sin \omega t, & \overline{p(t)} &= p_0 \cos \omega t - m\omega x_0 \sin \omega t, \\ \overline{(\Delta x(t))^2} &= a^2 (\cos^2 \omega t + (\hbar^2/m^2 \omega^2 a^4) \sin^2 \omega t)/2, \\ \overline{(\Delta p(t))^2} &= (\cos^2 \omega t + (m^2 \omega^2 a^4/\hbar^2) \sin^2 \omega t) \hbar^2/2a^2. \end{aligned}$$

Обратим внимание на то, что для осциллятора при значении $a^2 = \hbar/m\omega$ дисперсии как координаты, так и импульса в рас-

сматриваемом состоянии не зависят от времени, а их произведение принимает минимально возможное значение, определяемое соотношением неопределенности $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$. Такие состояния осциллятора называются *когерентными*, см. в связи с этим также 10.15. В заключение отметим, что вычисление искомых средних значений в шрёдингеровском представлении существенно более трудоемко, сравнить с решением задачи 6.2.

6.22. Используя уравнения движения (VI.4) для гейзенберговских операторов, нетрудно найти, что

$$d[\hat{p}_i(t), \hat{x}_k(t)]/dt = 0,$$

т. е. значение коммутатора не зависит от времени, и так как при $t = 0$ оно равно $-i\hbar\delta_{ik}$, то тем самым доказывается совместность коммутационных соотношений с уравнениями движения.

6.23. Используя вид гейзенберговских операторов координаты и импульса, установленный в задаче 6.20, находим

$$a) [\hat{p}(t), \hat{x}(t')] = -i\hbar; \quad б) [\hat{p}(t), \hat{x}(t')] = -i\hbar;$$

$$в) [\hat{p}(t), \hat{x}(t')] = -i\hbar \cos \omega(t - t')$$

соответственно для свободной частицы, частицы в однородном поле и осциллятора.

Равенство нулю коммутатора в) для осциллятора при значениях $t - t' = \pi(n + 1/2)/\omega$ (n — целое) имеет следующий смысл. Пусть в момент времени $t = 0$ состояние осциллятора характеризуется малым значением дисперсии координаты (в пределе $\Delta x \rightarrow 0$), так что координата имеет (почти) определенное значение. Тогда в моменты времени $t' = \pi(n + 1/2)/\omega$ уже импульс имеет (почти) определенное значение (сравнить с результатом из 1.30 и выражениями для дисперсии координаты и импульса осциллятора из 6.21).

6.24. Взаимодействие частицы с полем описывается выражением $\hat{U} = -\mathbf{F}(t)\hat{\mathbf{r}}(t)$. При этом

$$d\hat{\mathbf{p}}(t)/dt = (i/\hbar) [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}(t)] = \mathbf{F}(t).$$

Отсюда следует (аналогично классическому случаю)

$$\hat{\mathbf{p}}(t) = \hat{\mathbf{p}}(-\infty) + \int_{-\infty}^t \mathbf{F}(t') dt'. \quad (1)$$

Так как при $t \rightarrow \pm\infty$ гамильтониан частицы имеет вид

$$\hat{H}(\pm\infty) = \hat{\mathbf{p}}^2(\pm\infty)/2m,$$

то согласно (1) получаем

$$\begin{aligned} \bar{E}(\pm\infty) &= \\ &= \bar{E}(-\infty) + \frac{1}{m} \bar{\mathbf{p}}(-\infty) \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}(t) dt + \frac{1}{2m} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}(t) dt \right]^2. \quad (2) \end{aligned}$$

Это соотношение, как и (1), по виду аналогично классическому, которое получается из (2) заменой квантовомеханических средних величин их *определенными* классическими значениями, при этом естественно $E(-\infty) = p^2(-\infty)/2m$. Если же рассматривать статистический ансамбль классических частиц с некоторым распределением по импульсам, то для средних уже в классическом смысле значений будет непосредственно применимо соотношение (2).

6.25. Используя гейзенберговские операторы

$$\begin{aligned} \hat{a}(t) &= [\lambda \hat{x}(t) + i\lambda^{-1} \hat{p}(t)] / \sqrt{2\pi\hbar}, & \lambda &= \sqrt{m\omega}, \\ \hat{a}^+(t) &= [\lambda \hat{x}(t) - i\lambda^{-1} \hat{p}(t)] / \sqrt{2\pi\hbar}, & [\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)] &= 1, \end{aligned} \quad (1)$$

запишем гамильтониан рассматриваемой системы в виде

$$\hat{H}(t) = \hbar\omega (\hat{a}^+(t) \hat{a}(t) + 1/2) - \sqrt{\hbar/2m\omega} F(t) (\hat{a}(t) + \hat{a}^+(t)).$$

Уравнения движения для этих операторов

$$\begin{aligned} \dot{\hat{a}}(t) &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{a}(t)] = -i\omega \hat{a}(t) + \frac{F(t)}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \\ \dot{\hat{a}}^+(t) &= i\omega \hat{a}^+(t) + \frac{F(t)}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \end{aligned} \quad (2)$$

позволяют сразу найти их временную зависимость⁸⁾

$$\hat{a}(t) = e^{-i\omega t} \left(\hat{a}_{\text{in}} + \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \int_{-\infty}^t F(t') e^{i\omega t'} dt' \right). \quad (3)$$

Отсюда при $t \rightarrow \pm\infty$ имеем

$$\begin{aligned} \hat{a}(t) &= e^{-i\omega t} \hat{a}_{\text{in}} && \text{при } t \rightarrow -\infty, \\ \hat{a}(t) &= e^{-i\omega t} \hat{a}_{\text{f}}, \quad \hat{a}_{\text{f}} = \hat{a}_{\text{in}} + \alpha && \text{при } t \rightarrow +\infty. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь

$$\alpha = (2m\hbar\omega)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt.$$

Для гамильтониана системы получаем

$$\begin{aligned} \hat{H}(-\infty) &\equiv \hat{H}_{\text{in}} = \hbar\omega (\hat{a}_{\text{in}}^+ \hat{a}_{\text{in}} + 1/2), \\ \hat{H}(+\infty) &= \hbar\omega (\hat{a}_{\text{f}}^+ \hat{a}_{\text{f}} + 1/2). \end{aligned} \quad (5)$$

⁸⁾ Оператор $\hat{a}^+(t)$ получается эрмитовым сопряжением $\hat{a}(t)$. Не зависящий от времени оператор \hat{a}_{in} играет роль «начального» условия, при этом для него должно быть выполнено соотношение $[\hat{a}_{\text{in}}, \hat{a}_{\text{in}}^+] = 1$.

Не зависящий от времени в гейзенберговском представлении вектор состояния $|\Psi\rangle$ рассматриваемой системы определяется тем условием, что при $t \rightarrow -\infty$ осциллятор находится в основном состоянии, т. е. для него $\hat{H}_{in} |\Psi\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |\Psi\rangle$. Согласно (5) это состояние является «вакуумным» по отношению к операторам $\hat{a}_{in}, \hat{a}_{in}^+$, т. е. $|\Psi\rangle \equiv |0, in\rangle$, причем $\hat{a}_{in}|0, in\rangle = 0$.

Стационарные состояния осциллятора при $t \rightarrow +\infty$ описываются векторами состояний

$$|n, f\rangle = (n!)^{-1/2} (\hat{a}_f^+)^n |0, f\rangle,$$

так что коэффициенты в разложении $|0, in\rangle = \sum_n c_n |n, f\rangle$ определяют искомые вероятности переходов осциллятора $\omega(0 \rightarrow n) = |c_n|^2$. Подействовав на обе части приведенного разложения оператором \hat{a}_{in} и учтя его связь (4) с \hat{a}_i , а также соотношение

$$\hat{a}_f |n, f\rangle = \sqrt{n} |n-1, f\rangle,$$

приходим к рекуррентному соотношению $c_n = (\alpha/\sqrt{n}) c_{n-1}$. Из него следует, что $c_n = (\alpha^n/\sqrt{n!}) c_0$. При этом условии нормировки

$$\langle 0, in | 0, in \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1$$

дает $|c_0|^2 = \exp(-|\alpha|^2)$, и для вероятностей перехода получаем

$$\omega(0 \rightarrow n) = |\alpha|^{2n} \exp(-|\alpha|^2)/n! \quad (6)$$

(распределение Пуассона). Воспользовавшись значением $\bar{n} = |\alpha|^2$, находим

$$\bar{E}(+\infty) = \hbar\omega(\bar{n} + 1/2) = \hbar\omega(|\alpha|^2 + 1/2).$$

Укажем способ вычисления $\bar{E}(+\infty)$, не требующий расчета вероятностей перехода осциллятора. Согласно (4), (5) имеем

$$\hat{H}(+\infty) = H_{in} + \hbar\omega(|\alpha|^2 + \alpha\hat{a}_{in}^+ + \alpha^*\hat{a}_{in}).$$

Соответственно если при $t \rightarrow -\infty$ осциллятор находился в своем n -м квантовом состоянии, т. е. $|\Psi\rangle \equiv |n, in\rangle$ (при этом

$$\langle \Psi | \hat{a}_{in} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{a}_{in}^+ | \Psi \rangle = 0),$$

то

$$\bar{E}(+\infty) = E(-\infty) + \hbar\omega|\alpha|^2, \quad E(-\infty) = \hbar\omega(n + 1/2)$$

(заметим, что среднее значение приобретаемой осциллятором энергии, равное $\hbar\omega|\alpha|^2$, не содержит постоянной Планка и совпадает с результатом классической механики, см. [26]).

6.26. Пусть система K' движется со скоростью V вдоль оси x относительно системы K , так что $x = x' + Vt$, $t = t'$. Потенциальные энергии частицы в этих системах связаны соотношением

$$U'(x', t') \equiv U'(x - Vt, t) = U(x, t).$$

Унитарный оператор⁹⁾ \hat{O} , соответствующий преобразованию Галилея, находится из того условия, что если волновая функция $\Psi(x, t)$ удовлетворяет у. Ш. в системе K :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H}\Psi \equiv \left[\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x, t) \right] \Psi(x, t), \quad (1)$$

то функция $\Psi'(x', t) = \hat{O}\Psi(x, t)$ должна являться решением у. Ш. в системе K' (и наоборот):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(x', t) = \hat{H}'\Psi' \equiv \left[\frac{1}{2m} (\hat{p}')^2 + U'(x', t) \right] \Psi'(x', t). \quad (2)$$

Так как обе функции Ψ , Ψ' описывают одно и то же физическое состояние частицы (но по отношению к различным системам координат), то должно быть выполнено условие

$$|\Psi'(x', t)|^2 \equiv |\Psi'(x - Vt, t)|^2 = |\Psi(x, t)|^2, \quad (3)$$

выражающее независимость от выбора системы координат плотности вероятности нахождения частицы в данной точке пространства. Из (3) следует, что искомый оператор имеет вид

$$\hat{U} = \exp \{iS(x, t)\},$$

где $S(x, t)$ — вещественная функция. Подставив в уравнение (2)

$$\Psi'(x', t) = \exp \{iS(x, t)\} \Psi(x, t) \quad (4)$$

и перейдя в нем к переменным x, t , получим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + i\hbar \left(-\frac{\hbar}{m} \frac{\partial S}{\partial x} - V \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \left[U(x, t) - \frac{i\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \hbar V \frac{\partial S}{\partial x} + \hbar \frac{\partial S}{\partial t} \right] \Psi(x, t).$$

Потребовав, чтобы это уравнение было тождественно (1), приходим к системе уравнений

$$\frac{\hbar}{m} \frac{\partial S}{\partial x} + V = 0, \quad -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Из первого из них следует, что $S = -mVx/\hbar + f(t)$, а второе позволяет найти $f(t)$ и получить

$$S(x, t) = -mVx/\hbar + mV^2t/2\hbar + C \quad (5)$$

(несущественную постоянную C здесь можно опустить).

⁹⁾ Не путать с потенциальной энергией $U(x, t)$; мы ограничились для краткости записи случаем одномерного движения.

Найдем закон преобразования волновой функции частицы в импульсном представлении. Умножив (4) на $\Psi_{p'}(x')$ (с. ф. оператора импульса) и проинтегрировав по x' с учетом (5), получаем

$$\Phi'(p', t) = \exp\left(-i \frac{mV^2 t}{2\hbar} + i \frac{pVt}{\hbar}\right) \Phi(p, t), \quad p = p' + mV. \quad (6)$$

Отсюда следует естественное соотношение

$$\omega'(p - mV, t) = \omega(p, t)$$

между функциями распределения по импульсам частицы в системах K' и K .

6.27. Пусть в. ф. $\Psi(\mathbf{r}, t)$ является решением у. Ш.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 \Psi + e\varphi(\mathbf{r}, t) \Psi, \quad (1)$$

где $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, $\varphi(\mathbf{r}, t)$ — потенциалы внешнего электромагнитного поля. Инвариантность у. Ш. относительно калибровочного преобразования потенциалов означает, что если перейти к новым потенциалам

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f(\mathbf{r}, t), \quad \varphi' = \varphi - \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, t),$$

то должен существовать такой унитарный оператор U , что волновая функция $\Psi' = U\Psi$, описывающая то же самое физическое состояние частицы, что и исходная в. ф. Ψ (но с другим выбором потенциалов), и поэтому удовлетворяющая соотношению $|\Psi'(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, является решением уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \Psi' + e\varphi' \Psi'. \quad (2)$$

Ввиду неизменности плотности вероятности, искомый оператор должен иметь вид

$$\hat{U} = \exp\{iS(\mathbf{r}, t)\},$$

где $S(\mathbf{r}, t)$ — вещественная функция (сравнить с предыдущей задачей). Подставив в. ф. вида

$$\Psi'(\mathbf{r}, t) = \exp\{iS(\mathbf{r}, t)\} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

в уравнение (2) и потребовав, чтобы получающееся уравнение совпадало с уравнением (1), приходим к соотношениям

$$c\hbar \nabla S(\mathbf{r}, t) = e\nabla f(\mathbf{r}, t), \quad c\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{r}, t) = e \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, t).$$

Отсюда находим $S(\mathbf{r}, t) = ef(\mathbf{r}, t)/\hbar c + C$, что и решает задачу (несущественную постоянную C здесь можно опустить). Очевидно, что для системы заряженных частиц

$$\hat{U} = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar c} \sum_n e_a f(\mathbf{r}_a, t) \right\}.$$

6.28. При унитарных преобразованиях волновые функции и операторы преобразуются следующим образом:

$$\Psi \rightarrow \Psi' = \hat{U}\Psi, \quad \hat{f} \rightarrow \hat{f}' = \hat{U}\hat{f}\hat{U}^+.$$

В частности, для гамильтониана системы имеем

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^+. \quad (1)$$

Выясним, какой вид принимает уравнение Шрёдингера при унитарном преобразовании, зависящем явно от времени. Подействовав на обе части исходного у. Ш. оператором $\hat{U}(t)$, получаем

$$i\hbar \hat{U} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{U}\Psi) - i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \Psi = \hat{U}\hat{H}\Psi.$$

Подставив сюда $\Psi' = \hat{U}\Psi$ и учтя, что $\hat{U}^+\hat{U} = 1$, приходим к уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi' = \left\{ \hat{U}\hat{H}\hat{U}^+ + i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \hat{U}^+ \right\} \Psi',$$

представляющему уравнение Шрёдингера с гамильтонианом

$$\hat{H}'' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^+ + i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \hat{U}^+ = \hat{H}' + i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \hat{U}^+, \quad (2)$$

что и решает поставленную задачу (\hat{H}'' — эрмитов оператор).

Итак, при зависящем от времени унитарном преобразовании в соответствие гамильтониану системы \hat{H} можно поставить два оператора: \hat{H}' и \hat{H}'' . Для понимания полученного результата и выяснения роли этих операторов необходимо иметь в виду следующее обстоятельство. Гамильтониан системы играет, вообще говоря, двоякую роль: 1) он определяет временную эволюцию волновой функции в соответствии с уравнением Шрёдингера и 2) в случае его независимости от времени он является интегралом движения, при этом его с. з. имеют непосредственный физический смысл, определяя энергетический спектр системы.

Если исходный гамильтониан \hat{H} не зависит от времени, то при зависящем от времени унитарном преобразовании отмеченные его роли распределяются между операторами \hat{H}'' и \hat{H}' : оператор \hat{H}'' определяет временную эволюцию волновой функ-

ции системы, а оператор \hat{H}' принимает на себя роль интеграла движения (спектры с. з. \hat{H} и $\hat{H}'(t)$ совпадают).

Если же $\hat{H}(t)$ зависит от времени, то гамильтониан утрачивает роль интеграла движения (энергия уже не сохраняется). При этом с. з. «мгновенных» гамильтонианов $\hat{H}(t)$ и $\hat{H}'(t)$ в общем случае не имеют глубокого физического смысла. Оператор же $\hat{H}''(t)$ по-прежнему определяет временную эволюцию¹⁰⁾.

Иллюстрацией проведенного рассмотрения является переход к гейзенберговскому представлению в случае $\partial\hat{H}/\partial t = 0$, осуществляемый унитарным оператором $U = \exp(i\hat{H}t/\hbar)$. При этом $\hat{H}' = \hat{H}$, $\hat{H}'' = 0$ и из у. Ш. в новом представлении следует, как и должно быть, независимость в. ф. системы в гейзенберговском представлении от времени.

Унитарные преобразования в квантовой механике являются аналогом канонических преобразований в классической механике. При этом соотношение (2) для гамильтониана системы является квантовомеханическим обобщением формулы

$$H''(P, Q, t) = H(P, Q, t) + \frac{\partial f}{\partial t}$$

классической механики [26, с. 181], выражающей преобразование функции Гамильтона при каноническом преобразовании, осуществляемом зависящей явно от времени производящей функцией $f(t)$.

6.29. Вид унитарного оператора $U = \exp(i\hat{L}\omega t)$, осуществляющего рассматриваемое преобразование, определяется известным из теории углового момента законом преобразования волновой функции при повороте системы координат; здесь ω — угловая скорость вращающейся системы координат относительно исходной инерциальной системы отсчета. При этом закон преобразования в. ф. имеет вид

$$\Psi'(\mathbf{r}, t) = \exp(i\hat{L}\omega t) \Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi(\mathbf{r}', t), \quad (1)$$

где $\Psi'(\mathbf{r}, t)$ — в. ф. во вращающейся системе, а $\Psi(\mathbf{r}', t)$ — исходная в. ф. в неподвижной системе координат. При этом \mathbf{r} — радиус-вектор относительно вращающейся системы, а $\mathbf{r}' = \hat{R}\mathbf{r}$ — радиус-вектор точки пространства в неподвижной системе, которая в момент времени t совпадает с точкой \mathbf{r} . Равенство (1) означает, что значение в. ф. системы не зависит от того,

¹⁰⁾ Если же \hat{H}'' , в отличие от $\hat{H}(t)$, не зависит от времени, то он выполняет обе отмеченные выше роли гамильтониана, см. в связи с этим 6.29.

в переменных какой системы координат (неподвижной \mathbf{r}' или вращающейся \mathbf{r}) она описывается¹¹⁾.

Найдем вид операторов физических величин в новом представлении, т. е. во вращающейся системе координат, и их связь с операторами в исходной, неподвижной системе координат. Определим сначала вид операторов радиуса-вектора $\hat{\mathbf{r}}_{\text{неп}}(t)$ и импульса $\hat{\mathbf{p}}_{\text{неп}}(t)$ относительно исходной системы. Используя результат задачи 6.19 и известные значения коммутаторов компонент $\hat{\mathbf{r}}$ и \mathbf{p} с $\hat{\mathbf{L}}$, см. (III.2), согласно общей формуле преобразования операторов $\hat{f}' = \hat{U}\hat{f}\hat{U}^+$, находим:

$$\begin{aligned} \hat{x}_{\text{неп}}(t) &= \hat{U}\hat{x}\hat{U}^+ = \hat{U}_x\hat{U}^+ = x \cos \omega t - y \sin \omega t, \\ \hat{y}_{\text{неп}}(t) &= x \sin \omega t + y \cos \omega t, \quad \hat{z}_{\text{неп}}(t) = z, \end{aligned} \quad (2)$$

а также

$$\begin{aligned} \hat{p}_{x, \text{неп}}(t) &= \hat{U} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \hat{U}^+ = \hat{p}_x \cos \omega t - \hat{p}_y \sin \omega t, \\ \hat{p}_{y, \text{неп}}(t) &= \hat{p}_x \sin \omega t + \hat{p}_y \cos \omega t, \quad \hat{p}_{z, \text{неп}}(t) = \hat{p}_z, \end{aligned} \quad (3)$$

здесь $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ и т. д., а ось z направлена вдоль вектора $\boldsymbol{\omega}$.

Соотношения (2) имеют очевидный смысл и означают¹²⁾, что оператор радиуса-вектора частицы является умножением на \mathbf{r} как во вращающейся, так и в неподвижной системах координат (компоненты же вектора в этих системах координат различны и связаны обычными формулами для преобразования векторов при поворотах системы координат). Аналогично соотношения (3), также имеющие вид формул преобразования компонент вектора при поворотах системы координат, означают, что и оператор импульса частицы в обеих системах координат одинаков и имеет вид $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Точно так же одинаковый вид в неподвижной и вращающейся системах имеет оператор момента импульса

$$\hbar\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}] = [\hat{\mathbf{r}}_{\text{неп}}\hat{\mathbf{p}}_{\text{неп}}].$$

¹¹⁾ Сравнить с задачами 6.26 и 6.27, в которых при соответствующих унитарных преобразованиях не изменялась лишь плотность вероятности.

¹²⁾ Во избежание недоразумений сделаем следующее разъяснение. До преобразования \mathbf{r} является радиусом-вектором относительно исходной системы координат, при этом $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$. После выполнения преобразования это соотношение относится уже к частице во вращающейся системе, а исходный оператор (сохраняющий свой физический смысл) преобразуется обычным образом, $\hat{\mathbf{r}}' = \hat{U}\hat{\mathbf{r}}\hat{U}^+$. Это замечание остается справедливым и в отношении импульса частицы.

Гамильтониан же частицы $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + U(\mathbf{r}, t)$ при переходе во вращающуюся систему координат изменяется и согласно формуле (2) из 6.28 имеет вид

$$\hat{H}_{\text{вр}} = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^+ - \hbar\omega\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U'(\mathbf{r}, t) - \hbar\omega\hat{\mathbf{L}}, \quad (4)$$

где $U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}', t)$ — потенциальная энергия частицы в переменных вращающейся системы координат. Теперь, имея в виду соотношение $\hat{\mathbf{v}} = \dot{\hat{\mathbf{r}}} = i[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}]/\hbar$, нетрудно найти операторы скорости частицы в неподвижной и вращающейся системах:

$$\hat{\mathbf{v}}_{\text{неп}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}, \quad \hat{\mathbf{v}}_{\text{вр}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} - [\omega\mathbf{r}] = \hat{\mathbf{v}}_{\text{неп}} - [\omega\hat{\mathbf{L}}] \quad (5)$$

(сравнить с результатами классической механики, см. [26]).

Наконец, рассмотрим частицу, находящуюся во внешнем поле, источники которого вращаются с постоянной угловой скоростью относительно некоторой оси, так что потенциальная энергия в исходной системе координат $U(\mathbf{r}, t)$ зависит явно от времени. Переходя во вращающуюся вместе с источниками поля систему координат, согласно (4) находим

$$\hat{H}_{\text{вр}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U'(\mathbf{r}) - \hbar\omega\hat{\mathbf{L}}. \quad (6)$$

Существенно, что теперь как $U'(\mathbf{r})$, так и гамильтониан в целом не зависят явно от времени, так что энергия во вращающейся системе координат является интегралом движения; так, для частицы в электрическом поле циркулярно-поляризованной монохроматической волны $U'(\mathbf{r}) = -e\mathcal{E}_0x$.

В заключение заметим, что полученные в данной задаче результаты являются естественным квантовомеханическим обобщением соответствующих выражений классической механики, см. [26, § 39].

6.30. Связь волновых функций и операторов в представлении взаимодействия (они снабжены индексом int) со шрёдингеровскими имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{int}}(t) &= \exp(i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar)\Psi(t), \\ \hat{f}_{\text{int}}(t) &= \exp(i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar)\hat{f}\exp(-i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar). \end{aligned} \quad (1)$$

При этом если $\hat{f} = f(\hat{p}, \hat{q}, t)$, то $\hat{f}_{\text{int}} = f(\hat{p}_{\text{int}}, \hat{q}_{\text{int}}, t)$.

Продифференцировав (1) по времени, получаем уравнение движения для соответствующего оператора

$$\frac{d}{dt}\hat{f}_{\text{int}} = \frac{\partial}{\partial t}\hat{f}_{\text{int}} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{f}_{\text{int}}], \quad (2)$$

причем

$$\hat{H}_0(\hat{p}, \hat{q}) = \hat{H}_{0, \text{int}} = \hat{H}_0(\hat{p}_{\text{int}}, \hat{q}_{\text{int}}); \quad \hat{p}_{\text{int}}(t_0) = \hat{p}, \quad \hat{q}_{\text{int}}(t_0) = \hat{q}.$$

Изменение со временем волновой функции системы определяется уравнением

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{int}} = \hat{H}'_{\text{int}} \Psi_{\text{int}}, \quad \hat{H}'_{\text{int}} = \hat{V}_{\text{int}} \quad (3)$$

(такой вид гамильтониана \hat{H}'_{int} в представлении взаимодействия следует из формулы (2) задачи 6.28).

Проиллюстрируем использование представления взаимодействия на примере осциллятора, находящегося в однородном, зависящем от времени внешнем поле. При этом

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad \hat{V} = -F(t)x,$$

а зависимость от времени операторов координаты и импульса в представлении взаимодействия такая же, как и в гейзенберговском представлении для свободного осциллятора. Соответственно, используя результат задачи 6.20 для $x(t)$, получаем

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{int}} &= -F(t) \hat{x}_{\text{int}} = \\ &= -F(t) \left[x \cos \omega(t - t_0) - \frac{i\hbar}{m\omega} \sin \omega(t - t_0) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

Для решения уравнения (3) с \hat{V}_{int} из (4) последовательными итерациями, учитывающими малость внешней силы $F(t)$, подставим в него

$$\Psi_{\text{int}}(x, t) = \Psi_0(x) + \Psi^{(1)}(x, t),$$

где в соответствии с постановкой задачи $\Psi_0(x)$ — в. ф. основного состояния осциллятора и $\Psi^{(1)}(x, t = -\infty) = 0$ (до включения силы осциллятор находится в основном состоянии). Теперь с учетом вида волновой функции, см. (II. 2),

$$\Psi_0(x) = (\pi a^2)^{-1/4} \exp(-x^2/2a^2), \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega},$$

согласно (3), (4) получаем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(1)}(x, t) = -F(t) e^{i\omega(t-t_0)x} \Psi_0(x).$$

Отсюда $\Psi^{(1)} = C_1(t) \sqrt{2} x \Psi_0(x)/a$, где

$$C_1(t) = i(2m\hbar\omega)^{-1/2} e^{-i\omega t_0} \int_{-\infty}^t F(t') e^{i\omega t'} dt'.$$

Имея в виду, что $\Psi_1 = \sqrt{2} x \Psi_0(x)/a$ является в. ф. первого возбужденного состояния осциллятора, замечаем, что под действием однородного поля в низшем порядке по F только в это состояние и возникают переходы из основного состояния. При этом вероятность перехода при $t \rightarrow +\infty$ оказывается равной¹³⁾

$$w^{(1)}(0 \rightarrow 1) = |C_1(+\infty)|^2 = \frac{1}{2m\hbar\omega} \left| \int_{-\infty}^{\infty} F(t) e^{i\omega t} dt \right|^2,$$

что для случая слабого поля согласуется с результатом точного решения, см. 6.25.

6.31. Действуя на соотношение $\hat{f}\Psi(q, 0) = f\Psi(q, 0)$ слева оператором $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ и учитывая связь в. ф. и операторов в шрёдингеровском и гейзенберговском представлениях, получаем $\hat{f}(-t)\Psi(q, t) = f\Psi(q, t)$. Если здесь выбрать $\hat{f} \equiv \hat{q} = q$, $f = q'$, то функция $\Psi(q, t)$ будет совпадать¹⁴⁾ с временной функцией Грина $G(q, t; q', 0)$, и мы приходим к уравнению для нее, приведенному в условии задачи.

Для свободной частицы $\hat{p}(t) = \hat{p}$ (оператор от времени не зависит). В импульсном представлении $\hat{p} = p$ и уравнение для функции Грина принимает вид $pG = p'G$. Отсюда

$$G(p, t; p', 0) = c(p, t) \delta(p - p'). \quad (1)$$

Воспользовавшись теперь у. Ш. (по переменным p, t), находим

$$c(p, t) = c_0(p) \exp(-ip^2t/2m\hbar),$$

а из начального условия при $t = 0$ следует $c_0(p) = 1$; приведенные соотношения полностью определяют вид временной функции Грина в импульсном представлении.

Аналогично, используя соотношение $\hat{r}(t) = \hat{r} + \hat{t}p/m$, имеем в координатном представлении $(r - \hat{t}p/m)G = r'G$, что является системой трех дифференциальных уравнений; для x -компоненты

$$(x + (i\hbar t/m) \partial/\partial x) G = x'G$$

и аналогично для других компонент. Решение этой системы уравнений имеет вид

$$G(r, t; r', 0) = a(r', t) \exp\left[i \frac{m(r - r')^2}{2\hbar t}\right]. \quad (2)$$

¹³⁾ Как и следовало ожидать, выражение для вероятности перехода не зависит от конкретного выбора момента времени t_0 .

¹⁴⁾ Действительно, функция $\Psi(q, t)$ при этом удовлетворяет у. Ш. по переменным q, t и при $t = 0$ равна $\delta(q - q')$, как и требуется для функции Грина.

Подставив эту функцию в у. Ш., получаем $\dot{a} = -3a/2t$, так что

$$a(\mathbf{r}', t) = a_0(\mathbf{r}') t^{-3/2}.$$

Для определения $a_0(\mathbf{r}')$ замечаем, что согласно начальному условию $\int G dV \rightarrow 1$ при $t \rightarrow 0$. Вычисляя интеграл, находим

$$a(\mathbf{r}', t) = a(t) = (-im/2\pi\hbar t)^{3/2},$$

что с учетом (2) завершает определение вида функции Грина.

Заметим, что это выражение можно было бы также получить следующими двумя способами: 1) непосредственным вычислением интеграла (VI.6), выбрав в нем с. ф. $\Psi_E(\mathbf{r})$ в виде плоских волн и выполнив интегрирование по \mathbf{p} , и 2) воспользовавшись (1) и общим выражением, связывающим ядра оператора в координатном и импульсном представлениях, как это было сделано в 2.20 для функции Грина стационарного у. Ш.

В заключение подчеркнем, что показатель экспоненты в выражении (2) равен iS/\hbar , где

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{1}{2} m v^2 t = \frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2t}$$

является *действием* для свободной классической частицы, движущейся из точки \mathbf{r}' при $t = 0$ в точку \mathbf{r} в момент времени t ; ее скорость при этом равна $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/t$, см. [26].

6.32. Так как $\hat{\mathbf{r}}(t) = \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{p}}t/m + \mathbf{F}_0 t^2/2m$, см. 6.20, то уравнение для функции Грина $\hat{\mathbf{r}}(-t)G = \mathbf{r}'G$ отличается от рассмотренного в предыдущей задаче лишь заменой \mathbf{r}' на $\mathbf{r}' - \mathbf{F}_0 t^2/2m$. Это же замечание справедливо и в отношении его решения (2) из 6.31. Теперь, однако,

$$\dot{a} = [-3/2t + i(\mathbf{F}_0 \mathbf{r}' - \mathbf{F}_0 t^2/2m)] a.$$

Отсюда находим $a(\mathbf{r}', t)$ и окончательное выражение для функции Грина в координатном представлении

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', 0) &= \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2t} \left(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \frac{\mathbf{F}_0 t^2}{2m} \right)^2 + \mathbf{F}_0 \mathbf{r} t - \frac{\mathbf{F}_0^2 t^3}{6m} \right] \right\} \end{aligned} \quad (1)$$

(как и в 6.31, показатель экспоненты — действие для классической частицы, движущейся в однородном поле).

В импульсном представлении

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}, t; \mathbf{p}', 0) &= \\ &= \exp \left[-\frac{it}{2m\hbar} \left(\mathbf{p}^2 - \mathbf{F}_0 \mathbf{p} t + \frac{1}{3} \mathbf{F}_0^2 t^2 \right) \right] \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}' - \mathbf{F}_0 t). \end{aligned}$$

6.33. Сначала найдем функцию Грина с помощью (VI.6).

Для осциллятора

$$\Psi_n = (2^n \sqrt{\pi} a n!)^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) H_n\left(\frac{x}{a}\right),$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

где $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$; суммирование в (VI.6) проводится с использованием известной из теории полиномов Эрмита формулы

$$(1 - z^2)^{-1/2} \exp\left[\frac{2xyz - (x^2 + y^2)z^2}{1 - z^2}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x) H_n(y)}{2^n n!} z^n$$

и приводит к следующему результату:

$$G(x, t; x', 0) = \frac{\exp[i \operatorname{ctg}(\omega t) \cdot (x^2 - 2xx' \sec \omega t + (x')^2)/2a^2]}{\sqrt{2\pi i a^2 \sin \omega t}}. \quad (1)$$

При определении вида функции Грина с помощью уравнения из 6.31 имеем (гейзенберговский оператор координаты осциллятора см. в 6.20):

$$\hat{x}(-t)G \equiv \left(x \cos \omega t + ia^2 \sin \omega t \frac{\partial}{\partial x}\right) G = x'G.$$

Отсюда

$$G = c(x', t) \exp[i(x^2 \operatorname{ctg} \omega t - 2xx' \operatorname{cosec} \omega t)/2a^2].$$

Подставив это выражение в у. Ш., получаем уравнение

$$\dot{c} + \frac{1}{2}(\omega \operatorname{ctg} \omega t + i\omega(x')^2/a^2 \sin^2 \omega t)c = 0.$$

Его решение

$$c = c_0 (\sin \omega t)^{-1/2} \exp[i(x')^2 \operatorname{ctg}(\omega t)/2a^2],$$

при этом из начального условия имеем $c_0 = (2\pi i a^2)^{-1/2}$ и для функции Грина опять приходим к выражению (1).

Так как для осциллятора у. Ш. в импульсном представлении имеет такой же вид, как и в координатном, то выражение для функции Грина $G(p, t; p', 0)$ получается из (1) в результате очевидных переобозначений: $x \rightarrow p$, $a \rightarrow \sqrt{\hbar m \omega}$.

6.34. Гамильтониан частицы во вращающейся системе координат имеет вид (см. 6.29)

$$\hat{H}_{\text{вр}} = \hat{p}^2/2m - \omega \hat{L}_z - F\hat{x}, \quad F = e\mathcal{E}_0.$$

Временную функцию Грина найдем с помощью уравнения из 6.31. Для этого сначала установим вид гейзенберговских

операторов $\mathbf{r}(t)$ и $\mathbf{p}(t)$. Для упрощения записи ниже в них будем опускать аргумент t (а для шрёдингеровских операторов будем использовать лишь их явные выражения: \mathbf{r} и $-i\hbar\nabla!$), а также положим $\hbar = m = 1$. Уравнения движения для операторов имеют вид

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \hat{p}_x + \omega \hat{y}, & \dot{y} &= \hat{p}_y - \omega \hat{x}, & \dot{z} &= \hat{p}_z, \\ \dot{\hat{p}}_x &= \omega \hat{p}_y + F, & \dot{\hat{p}}_y &= -\omega \hat{p}_x, & \dot{\hat{p}}_z &= 0.\end{aligned}$$

Ввиду линейности эту систему уравнений можно решать как для обычных неоператорных функций. Вводя комбинации $\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y$ и $\hat{x} \pm i\hat{y}$, находим

$$\hat{p}_x + i\hat{p}_y = \hat{A}_p e^{-i\omega t} - iF/\omega, \quad \hat{x} + i\hat{y} = (\hat{A}_x + t\hat{A}_p) e^{-i\omega t} - F/\omega^2,$$

где \hat{A}_x, \hat{A}_p — не зависящие от времени неэрмитовы операторы. Их явный вид определяется из совпадения при $t = 0$ гейзенберговских и шрёдингеровских операторов, что дает

$$\hat{A}_x = x + iy + F/\omega^2, \quad \hat{A}_p = -i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + iF/\omega.$$

Функция Грина с точностью до множителя $c(\mathbf{r}', t)$ определяется из системы уравнений $\hat{\mathbf{r}}(-t)G = \mathbf{r}'G$, сравнить с предыдущими задачами. Для решения системы уравнений удобно перейти от переменных x, y к $u = x + iy$ и $v = x - iy$. Далее, определяя $c(\mathbf{r}', t)$ так же, как и в указанных задачах¹⁵⁾, можно получить окончательное выражение для функции Грина:

$$\begin{aligned}G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', 0) &= (2\pi it)^{-3/2} \exp \left\{ \frac{i}{t} \left[\frac{1}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 + \rho\rho' (1 - \cos\omega t) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (x'y - xy') \sin\omega t + \omega^{-2}F (1 - \cos\omega t) (x + x') - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \omega^{-2}F (\omega t - \sin\omega t) (y - y') + \omega^{-4}F^2 (1 - \cos\omega t) - (2\omega^2)^{-1} F^2 t^2 \right] \right\},\end{aligned}\tag{1}$$

здесь ρ — составляющая радиуса-вектора в плоскости x, y . При $\omega \rightarrow 0$ выражение (1) переходит в функцию Грина из 6.32.

6.35. Рассмотрим сначала поперечное движение частицы в магнитном поле, воспользовавшись векторным потенциалом $\mathbf{A} = (0, \mathcal{H}x, 0)$. Учитывая установленный в задаче 7.1 а) вид $\Psi_{n\rho y}(\rho)$ с.ф. гамильтониана и его спектр $E_{t,n}$, согласно

¹⁵⁾ При этом, учитывая независимость гамильтониана от времени, при подстановке функции Грина в у.Ш. гамильтониан удобно выразить через шрёдингеровские операторы координаты и импульса частицы.

формуле (VI. 6), как и в 6.33, получаем

$$G_t(\rho, t; \rho_0, 0) = \sum_n \int e^{-i\omega_H(n+1/2)t} \Psi_{n\rho_y}(\rho) \Psi_{n\rho_y}^*(\rho_0) d\rho_y = \\ = \frac{1}{2\pi\hbar} \int G_{\text{осц}}(\bar{x}, t; \bar{x}_0, 0) e^{ip_y(y-y_0)/\hbar} d\rho_y. \quad (1)$$

Здесь $G_{\text{осц}}$ — функция Грина линейного осциллятора, найденная в 6.33, с частотой $\omega_H = |e|\mathcal{H}/mc$; $\bar{x} = x - c\rho_y/e\mathcal{H}$ и аналогично для \bar{x}_0 . Вычислив в (1) интеграл и умножив получающееся выражение¹⁶⁾ на $G_0(z, t; z_0, 0)$ — функцию Грина свободной частицы, см. 6.31, приходим к искомой временной функции Грина ($a^2 = \hbar/m\omega_H$):

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, 0) = (2\pi i\hbar t/m)^{-3/2} e^{iS/\hbar}, \quad (2) \\ S = \frac{m(z-z_0)^2}{2\hbar t} + \\ + \frac{1}{4a^2} \left[\text{cth} \frac{\omega_H t}{2} \cdot (\rho - \rho_0)^2 + 2 \frac{e}{|e|} (x + x_0)(y - y_0) \right],$$

где S — действие для классической частицы в магнитном поле, сравнить с 6.31 и 6.32.

Заметим, что при изменении калибровки векторного потенциала, т. е. при переходе к $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \Delta f(\mathbf{r})$, функция Грина в новой калибровке получается умножением (2) на

$$\exp\{ie[f(\mathbf{r}) - f(\mathbf{r}_0)]/\hbar c\},$$

сравнить с 6.27. В частности, для перехода к векторному потенциалу $\mathbf{A}' = [\mathcal{H}\mathbf{r}]/2$ следует выбрать $f = -\mathcal{H}xy/2$.

6.36. Гамильтониан частицы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - a\delta(x) - Fx. \quad (1)$$

Уровень E_0 дискретного спектра в изолированной δ -яме, см. 2.7, при наложении однородного поля приобретает ширину (размывается) и становится квазистационарным состоянием частицы. Возникновение ширины уровня Γ , определяющей время жизни $\tau = \hbar/\Gamma$ состояния, связано с возможностью проникновения частицы через барьер и ухода ее на бесконечность, см. рис. 33. Для

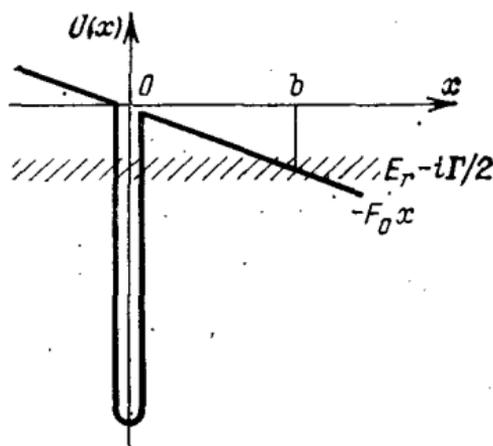


Рис. 33

¹⁶⁾ Мультипликативный вид функции Грина связан с разделением переменных поперечного и продольного движения частицы.

определения параметров квазистационарного состояния следует найти решение у. Ш., имеющее требуемые асимптотики при $x \rightarrow \pm\infty$: уходящая направо волна при $x \rightarrow +\infty$ (условие излучения) и затухающая волна в классически недоступной области при $x \rightarrow -\infty$, см. [1, § 134].

Для решения уравнения Шрёдингера замечаем, что как при $x > 0$, так и при $x < 0$, оно заменой переменной

$$z = \xi \left(x + \frac{E}{F} \right), \quad \xi = \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{1/3}$$

приводится к уравнению $\Psi'' + z\Psi = 0$. С учетом отмеченных выше асимптотик его решение следует выбрать в виде следующих комбинаций функций Эйри, см. [34, с. 264]:

$$\Psi = C_1 [\text{Ai}(-z) - i \text{Bi}(-z)] \underset{z \rightarrow +\infty}{\sim} z^{-1/4} \exp\left(i \frac{2}{3} z^{3/2}\right), \quad x > 0, \quad (2)$$

$$\Psi = C_2 \text{Ai}(-z) \underset{z \rightarrow -\infty}{\sim} (-z)^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} (-z)^{3/2}\right), \quad x < 0.$$

Условия сшивания решения в точке $x = 0$ согласно 2.6 приводят к соотношению ($z_0 = \xi E/F$)

$$\text{Ai}(-z_0) \text{Bi}(-z_0) + i \text{Ai}^2(-z_0) = \frac{\xi \hbar^2}{2\pi m \alpha}, \quad (3)$$

определяющему спектр квазидискретных уровней.

В случае слабого поля¹⁷⁾, когда $\xi \hbar^2/m\alpha \ll 1$, правая часть в уравнении (3) мала. Чтобы оно было выполнено, требуется малость и $\text{Ai}(-z_0)$, а для этого должно быть $\text{Re}(-z_0) \gg 1$. Воспользовавшись асимптотиками функций Эйри [34], согласно уравнению (3) получаем

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mE}\right)^{1/2} \left[\left(1 + \frac{5}{72\nu^2} + \dots\right) + \frac{i}{2} \left(1 + O\left(\frac{1}{\nu}\right)\right) e^{-2\nu} \right] = \frac{1}{\kappa_0}, \quad (4)$$

где $\nu = \frac{2}{3} (-z_0)^{3/2}$, $\kappa_0 = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$.

Решая уравнение (4) последовательными итерациями ($\text{Re } \nu \gg 1$), находим в нулевом приближении (когда выражение в квадратных скобках заменяется на 1) $E \approx E_0 = -\hbar^2 \kappa_0^2/2m$, что

¹⁷⁾ При нарушении этого условия (в достаточно сильном поле) происходит сильное уширение уровня и специфические свойства квазистационарного состояния на фоне непрерывного спектра исчезают.

соответствует невозмущенному уровню в δ -яме. Записав далее

$$E = E_0 + \Delta E - \frac{i}{2} \Gamma$$

и заменив ν в квадратных скобках в (4) значением нулевого приближения $\kappa_0 = \hbar^2 \kappa_0^3 / 3mF$, получаем сдвиг уровня ΔE и его ширину Γ , возникающие при наложении однородного поля:

$$\Delta E = -\frac{5}{8} \frac{mF^2}{\hbar^2 \kappa_0^4}, \quad \Gamma = \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{m} \exp\left(-\frac{2\hbar^2 \kappa_0^3}{3mF}\right). \quad (5)$$

Квадратичный по полю сдвиг уровня определяет поляризуемость основного состояния частицы в δ -яме, равную $\beta_0 = 5me^2 / 4\hbar^2 \kappa_0^4$ (положено $F = e\mathcal{E}$), и может быть рассчитан на основе второго порядка теории возмущений, сравнить с 8.12.

Экспоненциальная малость ширины уровня связана с малой проницаемостью барьера и может быть получена на основе квазиклассического выражения для проницаемости, см. (IX. 7), а также задачу 9.28. Такая экспоненциальная зависимость ширины уровня от его энергии и «напряженности» поля характерна для частицы в достаточно произвольном потенциале, убывающем на больших расстояниях, см. 11.67.

6.37. В. ф. квазистационарного s -состояния, $\Psi_{k, l=0} = \chi_k(r)/r$, удовлетворяет уравнению

$$-\chi_k'' + \tilde{\alpha} \delta(r-a) \chi_k = k^2 \chi_k, \quad (1)$$

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad \tilde{\alpha} = 2ma/\hbar^2,$$

граничному условию $\chi_k(0) = 0$ и имеет при $r \rightarrow \infty$ асимптотику вида $\chi_k \propto \exp(ikr)$. В такой постановке задачи решение существует лишь при некоторых комплексных значениях $k = k_1 - ik_2$, при этом

$$E = E_r - \frac{i}{2} \Gamma, \quad E_r = \frac{\hbar^2 (k_1^2 - k_2^2)}{2m}, \quad \Gamma = \frac{2\hbar^2 k_1 k_2}{m},$$

где E_r, Γ — энергия и ширина квазистационарного состояния (отметим, что $k_{1,2} > 0$).

Решение уравнения (1) имеет вид

$$\chi_k(r) = \begin{cases} C_1 \sin kr & r < a, \\ C_2 \exp(ikr), & r > a. \end{cases} \quad (2)$$

Условия сшивания в. ф. в точке $r = a$ согласно 2.6 дают

$$ika - ka \operatorname{ctg} ka = \tilde{\alpha} a, \quad (3)$$

что и определяет спектр квазидискретных s -уровней.

В случае $\bar{\alpha}a \gg 1$ из уравнения (3) следует, что значения ka для нижних уровней (таких, что $|ka| \ll \bar{\alpha}a$) близки к $(n+1)\pi$. Записав

$$k_n a = (n+1)\pi + \varepsilon_1 - i\varepsilon_2; \quad n = 0, 1, \dots, |\varepsilon_{1,2}| \ll 1$$

и подставив в (3), легко находим приближенные значения $\varepsilon_{1,2}$:

$$\varepsilon_1 \approx -(n+1)\pi/\bar{\alpha}a, \quad \varepsilon_2 \approx \varepsilon_1^2,$$

а с ними и спектр нижних квазидискретных s -уровней:

$$E_{r,n} \approx \left(1 - \frac{2}{\bar{\alpha}a}\right) E_n^{(0)}, \quad \Gamma_n \approx \frac{4\pi(n+1)}{(\bar{\alpha}a)^2} E_n^{(0)}, \quad (4)$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n+1)^2}{2ma^2}.$$

Как и следовало ожидать, положения квазидискретных уровней близки к s -уровням $E_n^{(0)}$ частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме радиуса a и переходят в них при $\alpha \rightarrow \infty$, когда потенциальный барьер становится непрозрачным.

Ширина квазистационарного состояния $\Gamma = \hbar\omega$ определяет вероятность ω его распада в единицу времени (или время жизни состояния $\tau = 1/\omega$). Выражение (4) для ширины уровня позволяет наглядно проиллюстрировать эту связь, если его записать в виде

$$\omega_n = \frac{\Gamma_n}{\hbar} = \left(\frac{2\pi(n+1)}{\bar{\alpha}a}\right)^2 \cdot \frac{\hbar\pi(n+1)}{2ma^2} \equiv DN;$$

здесь $D(E_{r,n})$ — вероятность прохождения δ -барьера при однократном столкновении, см. 2.30, а

$$N = \pi\hbar(n+1)/2ma^2 = v/2a$$

определяет число столкновений («ударов» частицы о барьер) в единицу времени. Подчеркнем, что ширины уровней много меньше расстояний между соседними уровнями.

В заключение отметим следующее обстоятельство. Полученные результаты полностью переносятся и на случай $\alpha < 0$ (δ -яма), что на первый взгляд представляется удивительным. Здесь проявляется особенность квантовомеханического отражения частиц потенциальной ямой в случае, когда она имеет резкие скачки или изломы: коэффициент прохождения при этом может быть малым, $D \ll 1$, даже при достаточно большой энергии частицы. Однако если перейти к плавной яме («размазать» δ -функцию), то уже будет $D \sim 1$ и квазистационарное состояние фактически исчезнет (время жизни его будет такого же порядка, что и время пролета частицей области локализации).

6.38. Поступая обычным образом, находим

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{2}{\hbar} U_1(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (1)$$

$$\rho = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*).$$

Интегрирование (1) по произвольному объему дает

$$\frac{d}{dt} \int_V |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = - \oint_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{s} - \frac{2}{\hbar} \int_V U_1(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV. \quad (2)$$

В случае $U_1 \equiv 0$ соотношение (2) представляет закон сохранения вероятности: изменение вероятности нахождения частицы в объеме V за единицу времени равно (со знаком минус) потоку вероятности через окружающую этот объем поверхность S . В случае же $U_1 \neq 0$ второе слагаемое в правой части соотношения (2) нарушает этот баланс и тем самым представляет дополнительный механизм изменения со временем вероятности, а следовательно, и нормировки волновой функции, что можно интерпретировать как изменение числа частиц: «поглощение» при $U_1 > 0$ и «рождение» при $U_1 < 0$. Отметим, что оптический потенциал обычно используется при описании какого-либо конкретного канала в многоканальной системе. При этом процессы «поглощения» и «рождения» отражают связь каналов, см. следующую задачу.

Для комплексной δ -ямы, как и в задаче 2.7, находим ($\alpha_0, \alpha_1 > 0$)

$$\Psi = A e^{-\kappa |x|}, \quad \kappa = \left(-\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2} = \frac{m}{\hbar^2} (\alpha_0 + i\alpha_1).$$

Отсюда $E = E_0 - i\Gamma/2$, где

$$E_0 = -\frac{m(\alpha_0^2 - \alpha_1^2)}{2\hbar^2}, \quad \Gamma = \frac{2m\alpha_0\alpha_1}{\hbar^2}$$

определяют положение и ширину квазидискретного уровня.

6.39. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} \delta(x) + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & Q_0 \end{pmatrix},$$

где m — приведенная масса частиц; ниже считаем $Q_0 > 0$, так что 1-е состояние составной частицы, которому соответствует верхняя компонента волновой функции (см. условие задачи), является *основным*. Уравнение Шрёдингера сводится к системе двух уравнений, причем для $x \neq 0$ имеем

$$\psi_1'' = -k_1^2 \psi_1, \quad \psi_2'' = -k_2^2 \psi_2, \quad (1)$$

где $k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ и $k_2 = \sqrt{2m(E - Q_0)/\hbar^2}$. Решение этой системы следует выбрать в виде $\psi_{1,2} = C_{1,2} \exp(ik_{1,2}|x|)$, здесь учтены как условие непрерывности волновой функции в точке $x = 0$, так и характер асимптотики¹⁸⁾ — расходящаяся волна — при $x \rightarrow \pm\infty$. Сшивание производных в.ф. в точке $x = 0$ производится как в 2.6 и дает

$$(ik_1 + \bar{\alpha}) C_1 + \bar{\beta} C_2 = 0, \quad \bar{\beta} C_1 + (ik_2 + \bar{\alpha}) C_2 = 0, \quad (2)$$

где $\bar{\alpha} = m\alpha/\hbar^2$ и $\bar{\beta} = m\beta/\hbar^2$. Условие существования нетривиального решения этой системы уравнений приводит к соотношению

$$(ik_1 + \bar{\alpha})(ik_2 + \bar{\alpha}) = \bar{\beta}^2, \quad (3)$$

определяющему энергетический спектр дискретных и квазидискретных уровней системы. Мы не будем подробно исследовать этот спектр, предоставляя это читателю, а ограничимся лишь несколькими замечаниями.

Прежде всего отметим, что при $\beta = 0$, когда нет связи между каналами (т. е. взаимодействие между частицами не оказывает влияния на «внутреннее» движение составной частицы), рассматриваемая система имеет два дискретных уровня: по одному в каждом из каналов. Это — обычные уровни д.с. в δ -яме. При этом в случае $E_2^{(0)} = Q_0 + E_0^{(0)} > 0$, где $E_1^{(0)} = E_0^{(0)} = -m\alpha^2/2\hbar^2$, дискретный уровень во втором канале лежит непосредственно на фоне непрерывного спектра первого канала. В такой ситуации включение даже слабой связи между каналами, $\beta \ll \alpha$, приводит к появлению у этого уровня ширины, а соответствующее состояние становится квазистационарным. При этом из (3) для энергии E_2 этого состояния получаем

$$E_2 \equiv E_r - \frac{i}{2} \Gamma \approx \\ \approx Q_0 + E_0^{(0)} - 2 \frac{\beta^2}{\alpha^2} |E_0^{(0)}| \left\{ \frac{E_0^{(0)}}{Q_0} + i \sqrt{\frac{(Q_0 - |E_0^{(0)}|) |E_0^{(0)}|}{Q_0^2}} \right\}, \quad (4)$$

так что уровень сдвигается вверх и приобретает ширину (дискретный же уровень $E_1^{(0)}$ из первого канала испытывает лишь небольшой сдвиг вниз).

В заключение на примере рассматриваемой системы продемонстрируем возможность введения *оптического потенциала*.

¹⁸⁾ При этом в случае *закрытого* канала волновая функция убывает на больших расстояниях.

Считая, что во втором канале система может оказаться лишь в результате перехода из первого канала, запишем в. ф. стационарного состояния системы с (вещественной!) энергией E в виде $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ C_2 \exp(ik_2|x|) \end{pmatrix}$. Условия сшивания в. ф. в точке $x = 0$ приводят к соотношениям (сравнить с (2))

$$-\frac{1}{2} \delta\psi_1'(0) = \bar{\alpha}\psi_1(0) + \bar{\beta}C_2, \quad -ik_2C_2 = \bar{\alpha}C_2 + \bar{\beta}\psi_1(0), \quad (5)$$

здесь $\delta\psi_1'(0)$ — скачок производной функции в точке $x = 0$. Исключая C_2 из этих соотношений, получаем

$$-\frac{1}{2} \delta\psi_1'(0) = \left(\bar{\alpha} - \frac{\bar{\beta}^2}{\bar{\alpha} + ik_2} \right) \psi_1(0). \quad (6)$$

Так как при $x \neq 0$ функция $\psi_1(x)$ по-прежнему удовлетворяет уравнению (1), то условие сшивания (6) (совместно с условием непрерывности $\psi_1(x)$) означает, что эта функция является решением стационарного у. Ш. с «потенциалом»

$$U_{\text{опт}}(x, E) = -\alpha_{\text{опт}}(E) \delta(x), \quad (7)$$

где

$$\alpha_{\text{опт}}(E) = \alpha - \frac{m\beta^2}{m\alpha + i\hbar^2 k_2(E)}. \quad (8)$$

Таким образом, динамика в одном из каналов исходной двухканальной системы может быть рассмотрена на основе волновой функции только этого канала¹⁹⁾, причем соответствующее уравнение имеет вид стационарного уравнения Шрёдингера с одноканальным гамильтонианом. Отметим следующие свойства эффективного (оптического) потенциала в таком гамильтониане²⁰⁾.

1) Он сам зависит от энергии, так что соответствующий «гамильтониан» не является самосопряженным оператором.

2) Как видно из (7), (8), при значениях энергии в рассматриваемом канале, превышающих порог другого канала (т. е. в случае $E > U_0$), оптический потенциал приобретает мнимую часть, причем знак мнимой части потенциала — отрицательный. Это соответствует тому, что с точки зрения исходного канала переход системы в другой, открытый канал выступает как *поглощение*, сравнить с 6.38.

¹⁹⁾ Несмотря на взаимодействие между каналами системы, в том числе и переходы между каналами!

²⁰⁾ Такой простой вид эффективного (оптического) потенциала (7), (8) является спецификой рассматриваемой системы с точечным взаимодействием. В общем случае такой эффективный потенциал является нелокальным оператором, зависящим от энергии системы.

6.40. Понятия *квазиэнергии* и *квазиэнергетического состояния* (КЭС) возникают при рассмотрении квантовой системы, гамильтониан которой является периодической (с периодом $T = 2\pi/\omega$) функцией времени. КЭС определяются как такие состояния системы, волновые функции которых являются решением временного уравнения Шрёдингера и удовлетворяют условию

$$\Psi_{\varepsilon}(t + T, q) = e^{-i\varepsilon T/\hbar} \Psi_{\varepsilon}(t, q), \quad (1)$$

при этом ε называется квазиэнергией (сравнить с понятиями квазимпульса и с блоховскими функциями для частицы в пространственно периодическом потенциале, см. 2.53).

Волновую функцию КЭС можно записать в виде

$$\Psi_{\varepsilon}(t, q) = e^{-i\varepsilon t/\hbar} u_{\varepsilon}(t, q), \quad (2)$$

где $u_{\varepsilon}(t, q)$ — уже периодическая функция времени. Ее разложение в ряд Фурье

$$u_{\varepsilon}(t, q) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\omega t} C_{\varepsilon, k} \Phi_{\varepsilon, k}(q) \quad (3)$$

определяет *квазиэнергетические гармоники* $\Phi_{\varepsilon, k}(q)$.

Квазиэнергия (как и квазимпульс) определена не однозначно, а лишь с точностью до слагаемого, кратного $\pm\hbar\omega$. Для однозначного определения обычно используется либо условие приведения ее значения к одной зоне, например $-\hbar\omega/2 < \varepsilon \leq \hbar\omega/2$, либо условие, требующее, чтобы при адиабатическом выключении зависящей от времени части гамильтониана квазиэнергии совпадала с соответствующим значением энергии $E_n^{(0)}$ стационарного гамильтониана.

Понятие КЭС является естественным обобщением понятия стационарного состояния, а система волновых функций КЭС обладает свойствами, во многом аналогичными с.ф. стационарного гамильтониана. Так, волновые функции КЭС с различными квазиэнергиями ортогональны, причем в любой момент времени: они образуют полную систему. Соответственно аналогичное (VI.2) разложение по волновым функциям КЭС с постоянными коэффициентами определяет общее решение временного уравнения Шрёдингера.

Существенное различие между КЭС и стационарными состояниями проявляется, однако, в вопросах об излучении системы и о резонансном воздействии возмущения на нее. Если для системы со стационарным гамильтонианом H_0 частоты излучаемых фотонов (при спонтанных переходах между стационарными состояниями) и частоты гармонического возмущения,

вызывающего резонансные переходы в системе, определяются лишь частотами перехода, $\hbar\omega_{fi} = E_f^{(0)} - E_i^{(0)}$, то для КЭС ситуация иная. Соответствующие частоты для них определяются соотношением

$$\hbar\omega_{kns} = \varepsilon_k - \varepsilon_n \pm s\hbar\omega, \quad s = 0, 1, 2, \dots,$$

где $\varepsilon_{k,n}$ — уровни квазиэнергии, при этом возможны и значения $n = k$. Интенсивности же переходов для разных s зависят от амплитуд квазиэнергетических гармоник в (3).

Перейдем к решению задачи. Гамильтониан частицы имеет вид

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t) \right)^2. \quad (4)$$

Так как оператор импульса коммутирует с гамильтонианом, то обобщенный импульс является интегралом движения. При этом его с. ф., $\infty \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar)$, является также собственной функцией мгновенного гамильтониана, отвечающей с. з. $E(t)$, получающемуся из $\hat{H}(t)$ заменой в нем оператора $\hat{\mathbf{p}}$ на импульс \mathbf{p} . Это позволяет сразу записать решение уравнения Шрёдингера:

$$\Psi_{\mathbf{p}, \varepsilon_D}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p}\mathbf{r} - \int_0^t E(t') dt' \right) \right], \quad (5)$$

$$E(t) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t) \right)^2,$$

которое при периодической зависимости²¹⁾ векторного потенциала $\mathbf{A}(t)$ от времени описывает КЭС с квазиэнергией (ниже для определенности считаем, что $\overline{\mathbf{A}(t)} = 0$)

$$\varepsilon_p = \overline{E(t)} = \frac{1}{T} \int_0^T E(t) dt \equiv \frac{\mathbf{p}^2 + \mathbf{p}_0^2}{2m}, \quad \mathbf{p}_0^2 = \frac{e^2}{c^2} \overline{\mathbf{A}^2(t)} \quad (6)$$

(равной среднему значению энергии частицы за период).

В отношении физического смысла \mathbf{p} и \mathbf{p}_0^2 заметим, что так как

$$\mathbf{p} - e\mathbf{A}(t)/c = m\mathbf{v}(t) \quad \text{и} \quad \overline{\mathbf{A}(t)} = 0,$$

то $\mathbf{p} = m\bar{\mathbf{v}}$ (т. е. сохраняющийся импульс частицы определяет среднюю скорость). Далее, из приведенных соотношений следует

$$\frac{e}{c} \mathbf{A}(t) = m(\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}(t)), \quad \frac{e^2}{c^2} \overline{\mathbf{A}^2(t)} = m^2 \overline{(\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}(t))^2},$$

²¹⁾ При этом существенно, что для электрического поля $\overline{\mathbf{E}(t)} = 0$.

так что $p_0^2/2m$ определяет среднюю кинетическую энергию осцилляций частицы в электрическом поле (на фоне равномерного движения ее со скоростью \bar{v}).

Для линейно-поляризованной монохроматической волны имеем

$$\varepsilon_p - \frac{p^2}{2m} = \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{4m\omega^2} \quad (7)$$

(при движении частицы в поле циркулярной волны в правую часть следует ввести дополнительный множитель 2). Расходимость ε_p при $\omega \rightarrow 0$ соответствует неограниченному увеличению скорости частицы в постоянном однородном электрическом поле. Зависимость же $\delta\varepsilon \propto \omega^{-2}$ для изменения квазиэнергии под влиянием поля при значениях частоты $\omega \rightarrow \infty$ носит общий характер и справедлива для частицы, находящейся в достаточно произвольном потенциале, сравнить с результатом из 8.42.

6.41. Записав в. ф. системы в виде $\Psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar}$, где функции $\psi_{1,2}(t)$ являются амплитудами 1(2)-го стационарных состояний невозмущенного гамильтониана H_0 с энергией ε_0 , находим, что уравнение Шрёдингера $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Psi$ сводится к системе уравнений

$$i\hbar \dot{\psi}_1 = V_0 \sin(\omega t) \psi_2, \quad i\hbar \dot{\psi}_2 = V_0 \sin(\omega t) \psi_1.$$

Отсюда имеем

$$\psi_1 \pm \psi_2 = A_{\pm} \exp(\pm if(t)), \quad f(t) = \frac{V_0}{\hbar\omega} \cos \omega t$$

и соответственно

$$\Psi(t) = \frac{C_1}{\sqrt{2}} e^{i(f(t) - \varepsilon_0 t/\hbar)} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{C_2}{\sqrt{2}} e^{-i(f(t) + \varepsilon_0 t/\hbar)} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Каждое из двух слагаемых в волновой функции (1) описывает независимое КЭС, при этом квазиэнергии обоих состояний одинаковы и равны ε_0 . Разложение (см. [33, с. 987])

$$\exp(iz \cos \omega t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} i^k J_k(z) e^{ik\omega t}, \quad z = \pm \frac{V_0}{\hbar\omega}, \quad (2)$$

где J_k — функция Бесселя, позволяет определить в соответствии с формулой (3) из 6.40 амплитуды квазиэнергетических гармоник полученных КЭС. Их интенсивности, $\propto J_k^2(z)$, осциллируют по мере увеличения V_0 .

Отметим в заключение следующее обстоятельство. Если у гамильтониана H_0 имеются и другие уровни $\epsilon_n^{(0)}$, то резонансному переходу в невозмущенной системе с частотой $\omega_0 = \epsilon_0 - \epsilon_n^{(0)}$ при наличии возмущения V будет соответствовать серия резонансных переходов с частотами, равными $\omega_k = \omega_0 \pm k\omega$, где $k = 0, 1, \dots$. Амплитуды таких переходов определяются квазиэнергетическими гармониками.

6.42. Доказательство утверждения задачи основано на переходе во вращающуюся с угловой скоростью ω систему координат, в которой гамильтониан системы $H_{вр}$ уже не зависит от времени и энергия сохраняется, см. задачу 6.29. При этом стационарное состояние и его энергия во вращающейся системе являются КЭС и квазиэнергией относительно исходной системы координат, а соответствующие волновые функции связаны соотношением (1) из 6.29.

Глава 7

ДВИЖЕНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

7.1. а) Ввиду взаимной коммутативности операторов \hat{p}_y, \hat{p}_z и гамильтониана частицы

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left\{ \hat{p}_x^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} \mathcal{H}_0 x \right)^2 + \hat{p}_z^2 \right\},$$

с. ф. гамильтониана могут быть выбраны в виде

$$\Psi_{E p_y p_z}(x, y, z) = (2\pi\hbar)^{-1} \exp(i(p_y y + p_z z)/\hbar) \psi(x). \quad (1)$$

При этом из у. Ш. следует уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \psi''(x) + \frac{1}{2\mu} \left(p_y - \frac{e\mathcal{H}_0 x}{c} \right)^2 \psi(x) = E_t \psi(x),$$

где введена энергия $E_t = E - p_z^2/2\mu$ поперечного движения. Решение этого уравнения выражается через решение у. Ш. для линейного осциллятора с собственной частотой $\omega_H = |e|\mathcal{H}_0/\mu c$, см. (II. 2), так что

$$\Psi_{n p_y p_z} = (2\pi\hbar)^{-1} \exp[i(p_y y + p_z z)/\hbar] \Psi_n^{\text{осц}}(x - c p_y / e\mathcal{H}_0), \quad (2)$$

$$E_{n p_z} = E_{t, n} + p_z^2/2\mu, \quad E_{t, n} = \hbar\omega_H (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Подчеркнем, что энергетические уровни поперечного движения $E_{t, n}$ — уровни Ландау — являются дискретными, кратность их вырождения бесконечна (энергия не зависит от величины p_y ,

принимающей значения $-\infty < p_y < +\infty$), а «поперечная» часть с. ф. гамильтониана $\Psi_{n p_y p_z}$ не нормируема на единицу, так как $|\Psi|^2$ вообще не зависит от y).

б) При таком выборе векторного потенциала гамильтониан частицы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}_0 \hat{l}_z + \frac{e^2 \mathcal{H}_0^2}{8\mu c^2} \rho^2 \equiv \hat{H}_t + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu}. \quad (3)$$

Так как операторы \hat{l}_z , \hat{p}_z и \hat{H} взаимно коммутируют друг с другом, то с. ф. гамильтониана можно выбрать в виде (воспользовавшись цилиндрическими координатами)

$$\Psi_{E m p_z}(\rho, z, \varphi) = \frac{1}{2\pi \sqrt{\hbar}} \exp[i(m\varphi + p_z z/\hbar)] \sqrt{\rho} f(\rho) \quad (4)$$

и из у. Ш. получить уравнение для радиальной функции

$$f'' + \frac{2}{\rho} f' + \left[\frac{2\mu E_t}{\hbar^2} - \frac{m^2 - 1/4}{\rho^2} + \frac{em\mathcal{H}_0}{\hbar c} - \frac{e^2 \mathcal{H}_0^2}{4\hbar^2 c^2} \rho^2 \right] f = 0.$$

Это уравнение лишь переобозначением величин отличается от рассмотренного ранее в 4.5. Отсылая туда за деталями решения, приведем результаты:

$$\begin{aligned} \sqrt{\rho} f = C e^{-x/2} x^{|m|/2} F\left(\left(-2E_t/\hbar\omega_H + |m| + \right.\right. \\ \left.\left. + 1 - em/|e|\right)/2, |m| + 1, x\right), \quad (5) \\ x = \rho^2/2a_H^2, \quad a_H = \sqrt{\hbar/\mu\omega_H}, \quad \omega_H = |e|\mathcal{H}_0/\mu c. \end{aligned}$$

Требование, чтобы гипергеометрическая функция здесь сводилась к полиному:

$$\left(-2E_t/\hbar\omega_H + |m| + 1 - em/|e|\right)/2 = -n_\rho, \quad n_\rho = 0, 1, 2, \dots$$

определяет энергетический спектр поперечного движения частицы. Отсюда, в согласии с (2), следует

$$E_{t,n} = \hbar\omega_H(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad n = n_\rho + (|m| - em/|e|)/2. \quad (6)$$

При этом уровню $E_{t,n}$ с данным n соответствуют состояния частицы со значениями проекции момента m на направление магнитного поля, равными¹⁾

$$\begin{aligned} m = -n, -n + 1, \dots, 0, +1, \dots, +\infty \quad \text{при } e > 0, \\ m = -\infty, \dots, -1, 0, \dots, n \quad \text{при } e < 0, \end{aligned}$$

¹⁾ Обратим внимание на то, что основному уровню Ландау, с $n = 0$, отвечают состояния частицы лишь с такими m , что $e \cdot m \geq 0$. Для других значений проекции момента m уровни с минимально возможной энергией лежат выше, так как для них уже $n > 0$.

бесконечное число возможных значений m отвечает бесконечной кратности вырождения уровня Ландау.

Подчеркнем, что теперь с. ф. (4), (5) гамильтониана описывают локализованные в поперечных (перпендикулярных \mathcal{H}_0) направлениях состояния частицы. Для нормировки на единицу «поперечной» части $\Psi_{nm}(\rho, \varphi)$ с. ф. гамильтониана следует выбрать в (5) значение нормировочного коэффициента

$$|C|^2 = (|m| + n_\rho)! / n_\rho! (|m|!)^2 a_H^2.$$

В связи с вопросом о нормировке волновых функций стационарных состояний д. с. напомним, что для частицы в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$ они всегда локализованы в ограниченной области пространства. Необычные свойства их для частицы в однородном магнитном поле связаны с тем обстоятельством, что дискретные энергетические уровни поперечного движения имеют бесконечную кратность вырождения. Действительно, рассмотрим волновой пакет, составленный из с. ф. $\Psi_{n\rho y}$ (2) (зависимость в. ф. от z опускаем),

$$\Psi_n(x, y) = \int C(\rho_y) \Psi_{n\rho y}(x, y) d\rho_y.$$

Эта волновая функция также отвечает уровню Ландау $E_{l, n}$, причем если $\int |C(\rho_y)|^2 d\rho_y = 1$, то она уже нормирована на единицу и описывает локализованное состояние частицы, в отличие от ненормируемых на единицу с. ф. $\Psi_{n\rho y}$. И наоборот, из нормированных с. ф. Ψ_{nm} можно составить волновые функции вида $\tilde{\Psi}_n = \sum_m C_m \Psi_{nm}$. Они также отвечают уровню Ландау $E_{l, n}$, однако в случае $\sum_m |C_m|^2 = \infty$ уже не описывают локализованного в плоскости (x, y) состояния частицы.

7.2. 1) В классической механике движение заряженной частицы в перпендикулярной магнитному полю плоскости происходит по окружности (*ларморовская орбита*) с квадратом радиуса

$$\rho_L^2 = v_\perp^2 / \omega_H^2 \equiv (v_x^2 + v_y^2) / \omega_H^2, \quad \omega_H = |e| \mathcal{H} / \mu c. \quad (1)$$

При этом векторы ρ , ρ_0 , \mathbf{v}_\perp — радиусы-векторы частицы, центра орбиты (окружности) и скорость связаны соотношением

$$[\omega(\rho - \rho_0)] = \mathbf{v}_\perp, \quad \omega = (0, 0, \omega = -e\omega_H / |e|).$$

Эта формула выражает характер движения частицы в плоскости (x, y) — равномерное вращение, причем знак ω определяет

направление вращения (ось z направлена вдоль магнитного поля). Из нее следуют соотношения

$$x_0 = x - v_y/\omega, \quad y_0 = y + v_x/\omega, \quad \rho_0^2 = x_0^2 + y_0^2. \quad (2)$$

Квантовомеханическим обобщением выражений (1), (2) классической механики являются соответствующие эрмитовы операторы:

$$\begin{aligned} \hat{x}_0 &= \hat{x} - \hat{v}_y/\omega = x - (-i\hbar\partial/\partial y - eA_y/c)/\mu\omega, \\ \hat{y}_0 &= \hat{y} + \hat{v}_x/\omega, \quad \hat{\rho}_0^2 = \hat{x}_0^2 + \hat{y}_0^2, \quad \hat{\rho}_L^2 = (\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2)/\omega^2 \end{aligned} \quad (3)$$

(при этом $\mu\hat{v} = \hat{p} - eA/c$, $\hat{p} = -i\hbar\nabla$), для которых нетрудно установить следующие коммутационные соотношения²⁾:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}_0] &= [\hat{H}, \hat{y}_0] = [\hat{H}, \hat{\rho}_0^2] = [\hat{H}, \hat{\rho}_L^2] = 0, \\ [\hat{x}_0, \hat{y}_0] &= -i\hbar c/e\mathcal{H}, \quad [\hat{\rho}_0^2, \hat{\rho}_L^2] = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

Коммутативность введенных операторов с гамильтонианом частицы означает, что соответствующие физические величины являются интегралами движения, как и в классической механике.

2) Так как $\hat{\rho}_L^2 = 2\hat{H}_t/\mu\omega_H^2$, где $\hat{H}_t = \hat{H} - \hat{p}_z^2/2\mu$ — гамильтониан поперечного движения частицы, то воспользовавшись результатом из 7.1, находим спектр с.з. квадрата радиуса орбиты

$$(\rho_L^2)_n = (2n + 1)a_H^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots; \quad a_H^2 = \hbar c/|e|\mathcal{H}. \quad (5)$$

Далее, выбрав векторный потенциал в виде³⁾ $\mathbf{A} = [\mathcal{H}\mathbf{r}]/2$, замечаем, что

$$\mu\omega_H^2\hat{\rho}_0^2 = 2\hat{H}_t + 2(e/|e|)\omega_H\hat{I}_z,$$

так что в.ф. 4) из 7.1 являются с.ф. оператора $\hat{\rho}_0^2$, при этом спектр⁴⁾ его с.з.

$$(\rho_0^2)_k = (2k + 1)a_H^2, \quad k = n + em/|e| = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

²⁾ Их можно получить, не конкретизируя калибровки векторного потенциала, однако вычисления несколько упрощаются, если воспользоваться конкретным выбором $\mathbf{A} = (0, \mathcal{H}x, 0)$.

³⁾ Об изменении волновой функции системы при калибровочном преобразовании потенциалов см. задачу 6.27.

⁴⁾ Спектры операторов $\hat{\rho}_L^2$ и $\hat{\rho}_0^2$ могут быть получены непосредственно из сопоставления выражений (3) для них и коммутаторов $[\hat{x}_0, \hat{y}_0]$, $[\hat{v}_x, \hat{v}_y]$ с соответствующей парой равенств для линейного осциллятора: $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + m\omega^2\hat{x}^2/2$ и $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$, определяющей его спектр $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

Что же касается с.з. как оператора \hat{x}_0 , так и \hat{y}_0 , то они имеют непрерывный спектр. Отметим, в частности, что в.ф. $\Psi_{n p_y p_z}$ из 7.1 являются с.ф. оператора \hat{x}_0 , отвечающими с.з. $x_0 = -p_y/\mu\omega$. Однако ввиду некоммутативности операторов \hat{x}_0 и \hat{y}_0 положение самого центра орбиты точно не определено и ограничено соотношением неопределенности $\Delta x_0 \cdot \Delta y_0 \geq a_H^2/2$, сравнить с 1.30.

3) а) Воспользовавшись выражениями (4), (5) из 7.1 для волновых функций рассматриваемых состояний частицы с $m = -en/|e|$, получаем распределение вероятностей

$$d\omega(\rho) = |\Psi_{n m p_z}|^2 2\pi\rho d\rho = \frac{1}{n! a_H^2} \left(\frac{\rho^2}{2a_H^2} \right)^n e^{-\rho^2/2a_H^2} \rho d\rho, \quad (7)$$

с помощью которого находим

$$\bar{\rho} = \int \rho d\omega = \sqrt{2} \Gamma(n + 3/2) a_H/n! \quad (8)$$

$$\overline{\rho^2} = 2(n + 1) a_H^2, \quad \rho_{н.в.} = \sqrt{2n + 1} a_H.$$

Здесь $\rho_{н.в.}$ — наиболее вероятное значение переменной ρ , отвечающее максимуму распределения $d\omega/d\rho$.

Заметим также, что в рассматриваемых состояниях операторы $\hat{\rho}_0^2$ и $\hat{\rho}_L^2$ имеют определенные значения, равные согласно (5) и (6)

$$(\rho_0^2)_0 = a_H^2, \quad (\rho_L^2)_n = (2n + 1) a_H^2. \quad (9)$$

В случае $n \gg 1$ (квазиклассический предел), используя для гамма-функции асимптотику

$$\Gamma(x) \approx \sqrt{2\pi x} x^{-1/2} e^{-x} \quad \text{при } x \rightarrow \infty,$$

согласно (8) находим $\bar{\rho} \approx \sqrt{2na_H}$ и, таким образом,

$$\rho_{н.в.} = \sqrt{(\rho_L^2)_n} \approx \sqrt{\overline{\rho^2}} \approx \bar{\rho} \approx \sqrt{2na_H} \gg a_H. \quad (10)$$

Полученные соотношения означают, что радиальное (по переменной ρ) распределение вероятностей при $n \gg 1$ имеет резкий максимум вблизи значения $\rho_{н.в.}$. При этом выражение (7) в наиболее существенной области значений ρ можно преобразовать к виду

$$d\omega \approx (\pi a_H^2)^{-1/2} \exp[-(\rho - \rho_{н.в.})^2/a_H^2] d\rho \quad (11)$$

и найти $\Delta\rho \equiv \sqrt{\overline{\rho^2} - \bar{\rho}^2} \approx a_H/\sqrt{2} \ll \bar{\rho}$.

Таким образом, вероятность нахождения частицы заметно отлична от нуля лишь в узкой кольцеобразной области с радиусом $\sqrt{2|n|}a_H$ и шириной порядка a_H . Это соответствует переходу к классической картине движения, усредненной по периоду вращения: круговой орбите частицы, причем радиус ее связан с энергией частицы точно так же, как и в классической механике. При этом соотношение $m = -en/|e|$ для значений $n \gg 1$ после подстановок $m = M_z/\hbar$ и $n \approx E_t/\hbar\omega_H$ переходит в классическую связь между моментом частицы относительно центра орбиты и энергией ее поперечного движения:

$$E_t = |e|\hbar|M_z|/\mu c = \omega M.$$

б) Теперь, при $n = 0$ и $m = e|m|/|e|$, имеем распределение вероятностей

$$dw = \frac{1}{|m|! a_H^2} \left(\frac{\rho^2}{2a_H^2} \right)^{|m|} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2a_H^2}\right) \rho d\rho, \quad (12)$$

что отличается от (7) лишь заменой n на $|m|$. Аналогичная замена в формулах (8), (10), (11) определяет для данного случая и другие характеристики радиального распределения частицы.

Однако интерпретация рассматриваемых состояний частицы имеет мало общего с предыдущим случаем. Энергия поперечного движения при $n = 0$ принимает минимальное значение, равное $\hbar\omega_H/2$, и такие состояния являются существенно «неклассическими». Тем не менее, имея в виду, что теперь вместо (9)

$$(\rho_L^2)_0 = a_H^2, \quad (\rho_0^2)_{|m|} = (2|m| + 1)a_H^2,$$

при $|m| \gg 1$ пространственному распределению частицы в таких состояниях можно сопоставить следующую классическую картину: однородное распределение орбит минимального радиуса, равного $\sqrt{(\rho_L^2)_0} = a_H$ по узкой кольцеобразной области с радиусом $R \approx \sqrt{2|m|}a_H \gg a_H$ и шириной порядка a_H .

7.3. Направив ось z вдоль магнитного поля, а ось x — вдоль электрического и выбрав векторный потенциал в виде

$$A_x = 0, \quad A_y = \mathcal{H}x, \quad A_z = 0,$$

имеем гамильтониан частицы

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left\{ \beta_x^2 + \left(\beta_y - \frac{e\mathcal{H}}{c} x \right)^2 + \beta_z^2 \right\} - e\mathcal{E}x. \quad (1)$$

Его с. ф. ввиду взаимной коммутативности операторов ρ_y, ρ_z , \hat{H} можно выбрать в виде

$$\Psi_{E p_y p_z} = (2\pi\hbar)^{-1} \exp [i (p_y y + p_z z)/\hbar] f(x). \quad (2)$$

При этом из у. Ш. следует уравнение

$$f''(x) + [2\mu E_t + 2\mu e \mathcal{E} x - (p_y - e \mathcal{H} x/c)^2] \hbar^{-2} f(x) = 0, \quad (3)$$

здесь $E_t = E - p_z^2/2\mu$. Последнее уравнение сводится к у. Ш. для линейного осциллятора с собственной частотой $\omega_H = |e| \mathcal{H}/\mu c$, и, воспользовавшись его решением, см. (II.2), находим собственные функции и спектр гамильтониана (1) в виде

$$\Psi_{n p_y p_z} = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_y y + p_z z) \right] \Psi_{\text{осц}} \left(x - \frac{c p_y}{e \mathcal{H}} - \frac{\mu c^2 \mathcal{E}}{e \mathcal{H}^2} \right), \quad (4)$$

$$E_{n p_y p_z} = \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{c \mathcal{E} p_y}{\mathcal{H}} - \frac{\mu c^2 \mathcal{E}^2}{2 \mathcal{H}^2} + \frac{p_z^2}{2\mu}, \quad n = 0, 1, \dots$$

Отметим ряд свойств полученных результатов (4).

1) Энергетический спектр частицы — непрерывный, причем он не ограничен снизу. Это означает, что любой уровень д. с. заряженной частицы в потенциале, исчезающем ($U \rightarrow 0$) на больших расстояниях, при наложении электрического поля даже совместно с магнитным, приобретает *ширину* и становится *квазистационарным*, сравнить с 6.36.

2) Собственные функции гамильтониана (4) описывают состояния, в которых частица вдоль оси x является локализованной. Это обстоятельство при $\mathcal{E} < \mathcal{H}$ согласуется с финитным характером движения в направлении оси x классической частицы, см. [27, § 22].

3) Производные

$$\frac{\partial E_{n p_y p_z}}{\partial p_z} = \frac{p_z}{\mu}, \quad \frac{\partial E_{n p_y p_z}}{\partial p_y} = - \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{H}} c$$

определяют соответственно z -компоненту скорости частицы и скорость ее дрейфа⁵⁾ в направлении оси y , см. [27].

7.4. Направив ось z вдоль совместного направления электрического и магнитного полей, замечаем, что гамильтониан частицы отличается от рассмотренного в 7.1 лишь одним дополнительным слагаемым, равным $-e \mathcal{E} z$. При этом сохраняется разделение «поперечного» и «продольного» движений частицы, но

⁵⁾ Ввиду условия $v \ll c$ полученное решение (4) применимо фактически в случае, когда $\mathcal{E} \ll \mathcal{H}$.

теперь продольное движение соответствует частице в однородном поле, а не свободной, как в 7.1. Соответственно решение рассматриваемой задачи получается из формул задачи 7.1 заменой в них $\rho_z^2/2\mu$ на энергию E_t продольного движения и плоской волны $\Psi_{\rho_z}(z)$ на волновую функцию $\Psi_{E_t}(z)$ частицы в однородном поле, см. 2.41 а также [1, § 24]. Отметим в заключение, что как и в предыдущей задаче, энергетический спектр частицы является непрерывным и неограниченным снизу.

7.5. При выборе векторного потенциала $\mathbf{A} = [\mathcal{H}r]/2$, гамильтониан частицы в цилиндрических координатах с осью z , направленной вдоль магнитного поля, принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{e\mathcal{H}}{c\hbar} \hat{l}_z \right] + \left(\frac{k}{2} + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8\mu c^2} \right) \rho^2 + \hat{H}_l,$$

где

$$\hat{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{k}{2} z^2.$$

Благодаря взаимной коммутативности операторов \hat{l}_z , \hat{H}_l и \hat{H} с ф. гамильтониана можно выбрать в виде (оператор \hat{H}_l описывает линейный осциллятор)

$$\Psi_{Emn_2} = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \Psi_{n_2}^{\text{осц}}(z) \sqrt{\rho} f(\rho), \quad n_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

При этом у. Ш. сводится к уравнению

$$f'' + \frac{2}{\rho} f' + \left[\frac{2\mu E_t}{\hbar^2} + \frac{e\mathcal{H}m}{c\hbar} - \frac{m^2 - 1/4}{\rho^2} - \frac{\rho^2}{4a^4} \right] f = 0,$$

где $E_t = E - \hbar\omega(n_2 + 1/2)$, $\omega = \sqrt{k/\mu}$, $\omega_H = |e|\mathcal{H}/\mu c$, $a = (\hbar/\mu)^{1/2} (4\omega^2 + \omega_H^2)^{-1/4}$. Оно лишь переобозначением величин отличается от уравнения Шрёдингера, рассмотренного в задаче 4.5. Отсылая к ней за деталями решения, приведем окончательные результаты:

$$\sqrt{\rho} f_{n_1, m} = C (\rho/a)^{|m|} \exp(-\rho^2/4a^2) F(-n_1, |m| + 1, \rho^2/2a^2), \quad (2)$$

$$E_{t, n_1, m} = -\hbar\omega_H em/2 |e| + \hbar \sqrt{\omega_H^2 + 4\omega^2} (2n_1 + |m| + 1)/2, \quad n_1 = 0, 1, 2, \dots$$

Выражения (1) и (2) определяют собственные функции и спектр гамильтониана осциллятора в магнитном поле:

$$E_{n_1, m, n_2} = \hbar \sqrt{\omega_H^2 + 4\omega^2} (2n_1 + |m| + 1)/2 + \hbar\omega (n_2 + 1/2) - \hbar\omega_H e m / 2 |e|. \quad (3)$$

В случае слабого поля, когда $\omega_H \ll \omega$, отсюда имеем

$$E_{n_1, m, n_2} \approx E_N^{(0)} - \frac{e\hbar m}{2\mu c} \mathcal{H} + \frac{e^2 \hbar (2n_1 + |m| + 1)}{8\mu^2 c^2 \omega} \mathcal{H}^2. \quad (4)$$

Здесь $E_N^{(0)} = \hbar\omega (N + 3/2)$ описывает уровни невозмущенного осциллятора, см. 4.5, при этом $N = 2n_1 + |m| + n_2$. Линейная по \mathcal{H} часть сдвига уровня соответствует взаимодействию магнитного момента осциллятора с магнитным полем, которое описывается выражением $\hat{V} = -\hat{\mu}\mathcal{H}$, где $\hat{\mu} = e\hbar/2\mu c$ — оператор орбитального магнитного момента заряженной частицы. Квадратичное по \mathcal{H} слагаемое в (4) определяет *диамагнитную* часть сдвига уровня. В частности, для основного уровня линейный по полю сдвиг отсутствует и

$$\Delta E_0 \approx -\chi_0 \mathcal{H}^2 / 2, \quad \text{где} \quad \chi_0 = -e^2 \hbar / 4\mu^2 c^2 \omega$$

определяет *магнитную восприимчивость* основного состояния осциллятора.

В случае сильного магнитного поля, когда $\omega_H \gg \omega$, из (3) следует

$$E_{n_1, m, n_2} \approx E_{l, n} + \frac{\hbar\omega^2}{\omega_H} (2n_1 + |m| + 1) + E_{l, n_2}. \quad (5)$$

Теперь «поперечная» часть спектра определяется в основном действием магнитного поля и $E_{l, n} = \hbar\omega_H (n + 1/2)$ воспроизводит спектр уровней Ландау, при этом $n = n_1 + |m|/2 - em/2|e|$. Второе слагаемое в (5) дает поправку, учитывающую влияние упругой силы на поперечное движение частицы. Наконец, последнее слагаемое, $E_{l, n_2} = \hbar\omega (n_2 + 1/2)$, соответствует энергии свободных колебаний вдоль направления магнитного поля.

7.6. Действительно, собственные значения гамильтониана частицы $\hat{H} = (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2/2m$ являются положительными, а при значениях энергии $E > 0$ на больших расстояниях, где частица является свободной, не существует убывающих при $r \rightarrow \infty$ решений уравнения Шрёдингера. Однако хотя истинно связанных состояний частицы в магнитном поле и не существует, тем не менее у нее могут существовать *квазистационарные* состояния (см. § 5 главы 6), *время жизни* которых в макроскопических условиях практически может считаться бесконечно большим.

7.7. Воспользуемся, как и в задаче 2.3, вариационным методом. Выбрав векторный потенциал в виде $A = [\mathcal{H}r]/2$, запишем гамильтониан частицы

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \beta_z^2/2\mu + U(r),$$

где H_t — поперечная часть гамильтониана в чисто магнитном поле, направленном вдоль оси z , см. формулу (3) из 7.1. Рассмотрим теперь нормированные на единицу волновые функции вида

$$\Psi_m = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|z|} \Psi_{n=0, m}(\rho, \varphi), \quad (1)$$

где Ψ_{nm} — поперечная часть в.ф. (4) из задачи 7.1. Для нее $H_t \Psi_{0m} = (\hbar\omega_H/2) \Psi_{0m}$, где $\omega_H = |e|\mathcal{H}/\mu c$, так что среднее значение энергии частицы в состоянии с волновой функцией (1) равно

$$\begin{aligned} \bar{E}_m(\kappa) &= \int \Psi_m^* \hat{H} \Psi_m dV = \\ &= \frac{\hbar\omega_H}{2} + \frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu} + \kappa \int U(r) e^{-2\kappa|z|} |\Psi_{0m}|^2 dV. \end{aligned}$$

Так как по условию $U(r) \leq 0$, то отсюда следует, что при достаточно малых значениях параметра κ всегда будет $\bar{E}_m(\kappa) < \hbar\omega_H/2$. Это неравенство означает, что у рассматриваемого гамильтониана имеются с.з., меньшие $\hbar\omega_H/2$ — минимального значения энергии частицы в однородном магнитном поле и поэтому соответствующие связанным состояниям частицы, в которых она не может уйти на бесконечность. Подчеркнем, что число таких независимых состояний бесконечно велико, как и число различных значений величины проекции момента m (о возможных значениях m в зависимости от знака заряда частицы см. в 7.1).

Образование связанных состояний частицы в условиях рассматриваемой задачи даже в случае мелкой потенциальной ямы допускает простое объяснение: в поперечном направлении частица «связывается» уже одним магнитным полем, см. 7.1, а наличие ямы приводит к *связыванию* и в продольном направлении, как это всегда имеет место при одномерном движении, см. 2.3.

Обсудим случай мелкой ямы более подробно. При этом в.ф. связанных стационарных состояний приближенно имеют вид, сравнить с в.ф. (1):

$$\Psi_{Em}(r) \approx \Psi_{0m}(\rho, \varphi) \psi_{em}(z), \quad E = \hbar\omega_H/2 + \varepsilon. \quad (2)$$

Здесь учтено, что зависимость с. ф. гамильтониана от *поперечных* координат определяется в основном действием лишь магнитного поля. Подставив эту в. ф. в уравнение Шрёдингера, $\hat{H}\Psi_{Em} \approx E\Psi_{Em}$, после умножения его слева на $\Psi_{0m}^*(\rho)$ и интегрирования по координатам поперечного движения приходим⁶⁾ уже к одномерному у. Ш.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Psi_{Em}''(z) + [U_{m, \text{эф}}(z) - \epsilon_m] \Psi_{Em}(z) = 0 \quad (3)$$

с эффективной потенциальной энергией

$$\begin{aligned} U_{m, \text{эф}}(z) &= \int U(r) |\Psi_{0m}(\rho)|^2 d^2\rho = \\ &= \frac{2}{|m|!} \int_0^\infty U(r) \bar{\rho}^{2|m|+1} \exp(-\bar{\rho}^2) d\bar{\rho}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь

$$\bar{\rho} = \rho/\sqrt{2} a_H, \quad a_H = \sqrt{\hbar/\mu\omega_H}, \quad r = \sqrt{\rho^2 + z^2}$$

и при преобразованиях использован явный вид в. ф. (см. 7.1)

$$\Psi_{0m} = \bar{\rho}^{|m|} \exp(im\varphi - \bar{\rho}^2/2) / \sqrt{2\pi |m|!} a_H.$$

В случае мелкой ямы $U(r)$ эффективный потенциал (4) отвечает также мелкой одномерной яме и энергия уровня ϵ_m (отсчитываемая от основного уровня Ландау, см. (2)) определяется результатом 2.22:

$$\epsilon_m \approx -\frac{\mu\alpha_m^2}{2\hbar^2}, \quad \alpha_m = -\int_{-\infty}^{\infty} U_{m, \text{эф}}(z) dz \quad (5)$$

(при этом зависимость в. ф. (2) от z такая же, как и в (1) с $\kappa = \mu\alpha_m/\hbar^2$).

Простая оценка (она предлагается читателю) показывает, что, как и следовало ожидать, энергия связи рассматриваемых состояний мала: $|\epsilon_m| \ll \hbar\omega_H$. При этом энергия связи для состояний с различными значениями m проекции момента частицы существенно зависит от соотношения между «магнитной» длиной a_H и радиусом R потенциальной ямы. Особенно резкой является зависимость ϵ_m от m , когда $R \ll a_H \propto \mathcal{H}^{-1/2}$. В этом

⁶⁾ Подобный прием преобразования уравнения Шрёдингера характерен для *адиабатического приближения*, см. в связи в этом: 8.61.

случае в интеграле (4) можно заменить $\exp(-\tilde{\rho}^2)$ единицей и согласно (4), (5) получить

$$\varepsilon_m \propto (R/a_H)^{4|m|+4} \propto \mathcal{H}^{2|m|+2},$$

так что энергия связи частицы быстро уменьшается с увеличением $|m|$.

В заключение заметим, что ряд обобщений полученных выше результатов на случай, когда потенциальная яма $U(r)$ уже не является мелкой, содержится в 8.61.

7.8. Направив ось z вдоль магнитного поля, имеем гамильтониан частицы $\hat{H} = \hat{p}^2/2m - \mu_0 \mathcal{H} \hat{\sigma}_z$, см. (VII. 1). Ввиду взаимной коммутативности операторов \hat{H} , \hat{p} , $\hat{\sigma}_z$ сразу получаем с. ф. гамильтониана и соответствующие им значения энергии частицы

$$\Psi_{p s_z} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \chi_{s_z}, \quad E_{p s_z} = p^2/2m - 2\mu_0 \mathcal{H} s_z;$$

здесь χ_{s_z} — спиновые функции, являющиеся собственными функциями оператора \hat{s}_z , отвечающими с. з. $s_z = \pm 1/2$, см. 5.1.

7.9. Гамильтониан частицы отличается от гамильтониана бесспиновой частицы дополнительным слагаемым, имеющим вид $-\mu_0 \mathcal{H} \hat{\sigma}_z$ (см. (VII. 1), ось z направлена вдоль магнитного поля). Оно не зависит от пространственных координат, так что в уравнении Шрёдингера координатные и спиновые переменные разделяются. Это обстоятельство с учетом результата решения задачи 7.1 и сохранения s_z позволяет записать с. ф. рассматриваемого гамильтониана в виде

$$\Psi_{n p_z \nu s_z} = \Psi_{n p_z \nu}(\mathbf{r}) \chi_{s_z}; \quad (1)$$

здесь $\Psi_{n p_z \nu}(\mathbf{r})$ — с. ф. гамильтониана бесспиновой частицы; их явный вид зависит от выбора калибровки векторного потенциала (при этом $\nu \equiv p_y$ и $\nu \equiv m$ соответствует случаям а) и б) из 7.1). Приведенные собственные функции (1) отвечают энергии частицы

$$E_{n p_z s_z} = E_{t, n s_z} + \frac{p_z^2}{2m}, \quad E_{t, n s_z} = \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) - 2\mu_0 \mathcal{H} s_z, \quad (2)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$, $\omega_H = |e|\mathcal{H}/mc$; при этом дискретная часть спектра $E_{t, n s_z}$ связана с поперечным движением частицы и учитывает также взаимодействие с полем магнитного момента частицы.

Для электрона магнитный момент $\mu_0 = -|e|\hbar/2mc$ и из (2) следует $E_{t, n s_z} \equiv E_N = \hbar\omega_H N$, где $N = n + s_z + 1/2$, $N = 0, 1, \dots$. Этот спектр имеет следующие характерные особенно-

сти. Основной уровень, $N = 0$, является «невырожденным»⁷⁾, при этом его энергия $E_0 = 0$ ($n = 0$, $s_z = -1/2$), а уровни с $N \neq 0$ «двукратно» вырождены: им отвечают состояния как с $n = N$, $s_z = -1/2$, так и с $n = N - 1$, $s_z = +1/2$.

Отмеченные особенности спектра отражают *суперсимметричный* характер гамильтониана поперечного движения электрона в магнитном поле. Действительно, этот гамильтониан сводится к гамильтониану суперсимметричного осциллятора, рассмотренному в 10.26, так как его можно записать в виде

$$\hat{H}_t = (\hat{p}_\perp + |e|A_\perp/c)^2/2m + |e|\hbar\mathcal{H}\hat{\sigma}_z/2 \equiv \hbar\omega_H(\hat{b}^+\hat{b} + 1/2) + \hbar\omega_H(\hat{f}^+\hat{f} - 1/2). \quad (3)$$

Здесь $\hat{f} = (\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y)/2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, при этом $\hat{f}^+\hat{f} = (1 + \hat{\sigma}_z)/2$, $t\{\hat{f}, \hat{f}^+\}_+ = 1$, а $\hat{b} = (\hat{\pi}_y + i\hat{\pi}_x)/\sqrt{2m\hbar\omega_H}$, причем $\hat{\pi} \equiv m\mathbf{v} = (\hat{p} + |e|A/c)$, $[\hat{b}, \hat{b}^+] = 1$. Соответственно спин играет роль фермионной степени свободы, при этом $n_F = s_z + 1/2$, а орбитальное движение отвечает бозонной степени свободы, так что $n_B = n$. Спектр гамильтониана (3) теперь записывается в виде $E_{t, n_B n_F} = \hbar\omega_H(n_B + n_F)$. Он совпадает, естественно, со спектром $E_{t, n s_z}$ и объясняет отмеченные выше его закономерности.

В заключение приведем выражения для операторов \hat{Q} преобразования суперсимметрии, см. 10.26, в условиях данной задачи:

$$\hat{Q}^+ \equiv (\hat{Q}_1 + i\hat{Q}_2)/2 = q\hat{b}\hat{f}^+ = \frac{\hat{\pi}_y + i\hat{\pi}_x}{\sqrt{2m}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{Q} = (\hat{Q}^+)^+, \quad \hat{Q}_1 = \hat{Q}^+ + \hat{Q} = (\hat{\sigma}_x\hat{\pi}_y - \hat{\sigma}_y\hat{\pi}_x)/\sqrt{2m},$$

$$\hat{Q}_2 = -i(\hat{Q}^+ - \hat{Q}) = (\hat{\sigma}_x\hat{\pi}_x + \hat{\sigma}_y\hat{\pi}_y)/\sqrt{2m}.$$

При этом $q = \sqrt{\hbar\omega_H}$ и гамильтониан (3) может быть записан в следующих эквивалентных формах: $\hat{H}_t = \hat{Q}_1^2 = \hat{Q}_2^2 = \{\hat{Q}, \hat{Q}^+\}_+$.

7.10. 1) Имея в виду соотношения (V.3) и (VII.2), выполним следующие преобразования указанного в условии задачи гамильтониана:

$$\hat{H} = (\hat{\sigma}(\hat{p} - eA/c))^2/2m + e\varphi \equiv m\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k/2 + e\varphi = m(\delta_{ik} + i\varepsilon_{ikl}\hat{\sigma}_l)\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k/2 + e\varphi = m\hat{v}^2/2 + e\varphi - e\hbar\mathcal{H}\hat{\sigma}/2mc. \quad (1)$$

7) Мы отвлекаемся от вырождения, присущего уровням $E_{t, n}$ поперечного движения в магнитном поле бесспиновой частицы.

Отсюда видно, что он действительно является гамильтонианом Паули для заряженной частицы со спином $s = 1/2$, зарядом e и собственным магнитным моментом $\mu_0 = e\hbar/2mc$ в электромагнитном поле (такое значение μ_0 , следующее из уравнения Дирака [29], имеют электрон, мюон и их античастицы).

2) Для описания стационарного магнитного поля (в отсутствие электрического поля) удобно выбрать $\varphi = 0$, при этом векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ не зависит от времени. Соответственно не зависят явно от времени как оператор скорости частицы, так и оператор $\hat{\sigma}\hat{v}$. Поэтому, имея в виду выражение для гамильтониана $\hat{H} = m(\hat{\sigma}\hat{v})^2/2$ и формулу (VI.4) для дифференцирования операторов по времени⁸⁾, приходим к выводу о том, что оператор $\hat{\sigma}\hat{v}$ является оператором сохраняющейся физической величины (интегралом движения). Далее, при движении частицы в однородном магнитном поле \hat{v}^2 также является интегралом движения⁹⁾. Сохранение как $\hat{\sigma}\hat{v}$, так и \hat{v}^2 означает, что проекция спина частицы на направление ее скорости является интегралом движения.

Этот результат является отражением того физического обстоятельства, что изменение со временем векторов скорости и спина (и, в частности, их средних значений) частицы в однородном магнитном поле имеет одинаковый характер и представляет прецессию с частотой, равной ω_H , см. 7.15. Если же магнитный момент частицы отличается от значения $e\hbar/2mc$ (для $s = 1/2$), то угол между векторами скорости и спина изменяется со временем. Это обстоятельство лежит в основе экспериментального метода¹⁰⁾ определения аномальной части магнитного момента

$$\mu'_0 \equiv \mu_0 - e\hbar/2mc$$

в случае, когда она является малой величиной.

3) Соображения об отсутствии связанных состояний при движении заряженной бесспиновой частицы в магнитном поле, высказанные при решении задачи 7.6, непосредственно переносятся и на гамильтониан (1) (в случае $\varphi = 0$).

7.11. В условиях рассматриваемой задачи в гамильтониане Паули (VII.1) первые два слагаемых не зависят от спина, а последнее — от пространственных координат. Поэтому уравнение Шрёдингера имеет частные решения с разделенными переменными

⁸⁾ Заметим, что $\partial\hat{v}/\partial t = -(e/mc) \partial\mathbf{A}/\partial t$.

⁹⁾ Для бесспиновой частицы \hat{v}^2 сохраняется при движении и в неоднородном магнитном поле.

¹⁰⁾ См. подстрочное примечание к решению 7.15.

ными вида $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t)\chi(t)$, в которых функции ψ и χ удовлетворяют соответствующим у. Ш.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2 + e\varphi \right] \psi, \quad i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = -\frac{\mu}{s} \mathcal{H} \hat{s} \chi. \quad (1)$$

Общее же решение уравнения Шрёдингера описывается суперпозицией $(2s + 1)$ (в соответствии с числом независимых спиновых состояний) таких частных решений. При этом, записав волновую функцию произвольного состояния частицы в момент времени $t = 0$ в виде (для наглядности считаем $s = 1/2$)

$$\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, 0) \\ \psi_2(\mathbf{r}, 0) \end{pmatrix} = \psi_1(\mathbf{r}, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(\mathbf{r}, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

где каждое из двух слагаемых представляет в. ф. с разделенными переменными, в силу линейности у. Ш. получаем в произвольный момент времени

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) \chi_1(t) + \psi_2(\mathbf{r}, t) \chi_2(t),$$

где функции $\psi_{1,2}$ и $\chi_{1,2}$ удовлетворяют уравнениям (1) и соответствующим начальным условиям.

7.12. Направив ось z вдоль магнитного поля, имеем спиновую часть гамильтониана частицы в виде $\hat{H} = -\mu \mathcal{H} \hat{\sigma}_z$. При-

этом у. Ш. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \hat{H} \Psi(t)$ для спиновой в. ф. $\Psi(t) = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}$ сводится к уравнениям $\dot{C}_1 = i\omega C_1$, $\dot{C}_2 = -i\omega C_2$, где $\omega = \mu \mathcal{H} / \hbar$. Отсюда

$$C_1(t) = e^{i\omega t} C_1(0), \quad C_2(t) = e^{-i\omega t} C_2(0),$$

где постоянные $C_{1,2}(0)$ определяются начальными условиями, причем для нормированной волновой функции $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$.

Средние значения компонент вектора спина равны:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{s}}(t) &= \Psi^*(t) \frac{\hat{\sigma}}{2} \Psi(t); & \bar{s}_x(t) &= \bar{s}_x(0) \cos 2\omega t + \bar{s}_y(0) \sin 2\omega t, \\ \bar{s}_y(t) &= \bar{s}_y(0) \cos 2\omega t - \bar{s}_x(0) \sin 2\omega t, & \bar{s}_z(t) &= \bar{s}_z(0) = \text{const}, \end{aligned} \quad (1)$$

т. е. вектор $\bar{\mathbf{s}}(t)$ прецессирует вокруг магнитного поля с угловой скоростью, равной 2ω .

7.13. Результат предыдущей задачи непосредственно обобщается на случай магнитного поля $\mathcal{H}(t) = (0, 0, \mathcal{H}(t))$. Теперь у. Ш. принимает вид

$$i\hbar \dot{C}_1 = -\mu \mathcal{H}(t) C_1, \quad i\hbar \dot{C}_2 = \mu \mathcal{H}(t) C_2,$$

а его решение

$$C_1(t) = e^{i\xi(t)} C_1(0), \quad C_2(t) = e^{-i\xi(t)} C_2(0); \quad \xi(t) = \frac{\mu}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt.$$

Средние значения компонент вектора спина $\bar{s}(t)$ описываются формулами (1) предыдущей задачи с заменой в них ωt на $\xi(t)$, так что вектор $\bar{s}(t)$ вращается (вообще говоря, неравномерно) вокруг направления магнитного поля.

7.14. Спиновая часть гамильтониана частицы имеет вид

$$\hat{H} = -\mu \mathcal{H}(t) \hat{\sigma} = -\mu \begin{pmatrix} \mathcal{H}_1 & \mathcal{H}_0 \exp(-i\omega_0 t) \\ \mathcal{H}_0 \exp(i\omega_0 t) & -\mathcal{H}_1 \end{pmatrix}.$$

При этом у.Ш. для спиновой в.ф. $\Psi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$ сводится к системе уравнений

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a} &= -\mu \mathcal{H}_1 a - \mu \mathcal{H}_0 \exp(-i\omega_0 t) b, \\ i\hbar \dot{b} &= -\mu \mathcal{H}_0 \exp(i\omega_0 t) a + \mu \mathcal{H}_1 b. \end{aligned} \quad (1)$$

С помощью подстановок

$$a = \exp(-i\omega_0 t/2) \tilde{a}, \quad b = \exp(i\omega_0 t/2) \tilde{b}$$

она приводится к системе дифференциальных уравнений для функций $\tilde{a}(t)$, $\tilde{b}(t)$ уже с постоянными коэффициентами, что позволяет легко найти ее решение (сравнить с 6.9):

$$\begin{aligned} \tilde{a}(t) &= C_1 \exp(i\omega t) + C_2 \exp(-i\omega t), \\ \tilde{b}(t) &= \frac{\omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_1 \exp(i\omega t) - \frac{\omega + \gamma_1}{\gamma_2} C_2 \exp(-i\omega t); \end{aligned}$$

здесь

$$\gamma_1 = \mu \mathcal{H}_1 / \hbar + \omega_0/2, \quad \gamma_2 = \mu \mathcal{H}_0 / \hbar, \quad \omega = \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}.$$

Учитывая, что согласно начальным условиям $a(0) = 1$, $b(0) = 0$, находим окончательный вид нормированной в.ф.

$$\Psi(t) = \frac{1}{2\omega} \begin{pmatrix} [(\omega + \gamma_1) e^{i\omega t} + (\omega - \gamma_1) e^{-i\omega t}] e^{-i\omega_0 t/2} \\ 2i\gamma_2 \sin \omega t \cdot e^{i\omega_0 t/2} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

так что вероятность переворота спина, т. е. значения проекции $s_z = -1/2$, в момент времени t равна

$$W(s_z = -1/2, t) = \left(\frac{\gamma_2}{\omega} \right)^2 \sin^2 \omega t \equiv g \sin^2 \omega t, \quad (3)$$

где

$$g = \left(\frac{\gamma_2}{\omega} \right)^2 = \frac{\mathcal{H}_0^2}{\mathcal{H}_0^2 + (\mathcal{H}_1 + \hbar\omega_0/2\mu)^2}.$$

Вероятность переворота спина, как и значение параметра g , при выполнении условия $\mathcal{H}_0 \ll \mathcal{H}_1$ мала при всех значениях частоты ω_0 , за исключением узкой области частот вблизи точки $\omega_0, \text{рез} = -2\mu\mathcal{H}_1/\hbar$ и шириной порядка $\Delta\omega_0 \sim \mathcal{H}_0\mu/\hbar$. Отмеченный резонансный характер зависимости вероятности переворота спина от частоты лежит в основе одного из экспериментальных методов определения магнитных моментов частиц.

7.15. Задача решается аналогично 6.20. Приведем выражения для гейзенберговских операторов компонент радиуса-вектора, импульса и спина частицы:

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \hat{x} \cos \omega_0 t + \frac{\hat{p}_x}{m\omega_0} \sin \omega_0 t + \frac{\hat{p}_y}{m\omega_0} (1 - \cos \omega_0 t), \\ \hat{p}_x(t) &= \hat{p}_x \cos \omega_0 t + \hat{p}_y \sin \omega_0 t - m\omega_0 \hat{x} \sin \omega_0 t, \\ \hat{y}(t) &= \hat{y} - \hat{x} \sin \omega_0 t + \frac{\hat{p}_x}{m\omega_0} (\cos \omega_0 t - 1) + \frac{\hat{p}_y}{m\omega_0} \sin \omega_0 t, \\ \hat{p}_y(t) &= \hat{p}_y, \quad \hat{z}(t) = \hat{z} + t\hat{p}_z/m, \quad \hat{p}_z(t) = \hat{p}_z; \\ \hat{s}_x(t) &= \hat{s}_x \cos \omega t + \hat{s}_y \sin \omega t, \\ \hat{s}_y(t) &= \hat{s}_y \cos \omega t - \hat{s}_x \sin \omega t, \quad \hat{s}_z(t) = \hat{s}_z, \\ \omega_0 &= e\mathcal{H}_0/mc, \quad \omega = 2\mu\mathcal{H}_0/\hbar. \end{aligned}$$

Здесь $\hat{x}_i, \hat{p}_i, \hat{s}_i$ — соответствующие операторы в шрёдингеровском представлении.

Оператор скорости частицы $\hat{v} = d\hat{r}(t)/dt$ находится непосредственным дифференцированием оператора $\hat{r}(t)$. Изменение со временем средних значений $\bar{v}(t)$ и $\bar{s}(t)$ описывает прецессию этих векторов с угловыми скоростями, равными ω_0 и ω соответственно, так что в случае $\omega_0 = \omega$ угол между ними остается неизменным. Подчеркнем, что этот случай соответствует частице, имеющей спиновый магнитный момент μ , равный $\mu_D = e\hbar/2mc$, сравнить с 7.10. Если же $\omega_0 \neq \omega$, то угол между векторами $\bar{v}(t)$ и $\bar{s}(t)$ в азимутальной плоскости (перпендикулярной магнитному полю) изменяется со временем: $\Delta\varphi(t) = (g-2)\omega_0 t/2$, здесь $g = 2\mu/\mu_D$. Это обстоятельство лежит в основе экспериментального метода определения¹¹⁾ g -фактора частицы, когда он мало отличается от значения $g_D = 2$, следующего из уравнения Дирака; экспериментальные данные согласуются с предсказываемым квантовой электродинамикой

¹¹⁾ Изменение угла $\Delta\varphi(t)$ со временем — «накапливающийся» эффект. Поэтому за достаточно большое время движения частицы $\Delta\varphi$ может стать порядка 1, что позволяет надежно определить $(g-2)$ в случае малого значения этой величины.

небольшим отличием g -фактора для электрона и мюона от значения $g_D = 2$ [29].

7.16. Функция Грина $G_{\alpha\beta}(t, t')$ по определению удовлетворяет по переменным α, t уравнению Шрёдингера с гамильтонианом $\hat{H} = -\mu\mathcal{H}\hat{\sigma}_z$ (ось z направлена вдоль магнитного поля) и при $t = t'$ равна $G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$. Ее явный вид ($\omega = \mu\mathcal{H}/\hbar$):

$$G_{\alpha\beta}(t, t') = \begin{pmatrix} \exp[i\omega(t-t')] & 0 \\ 0 & \exp[-i\omega(t-t')] \end{pmatrix}_{\alpha\beta}.$$

7.17. Функция Грина получается из выражения предыдущей

задачи заменой в нем $\omega(t-t')$ на $\xi(t, t') = \frac{\mu}{\hbar} \int_{t'}^t \mathcal{H}(t) dt$.

7.18. В соответствии с полученным ранее в 7.11 результатом о разделении пространственных и спиновых переменных при движении частицы в однородном магнитном поле, искомая функция Грина является произведением

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \cdot G_{\alpha\beta}(t, t')$$

временной функции Грина свободной бесспиновой частицы, см. (VI. 7), и спиновой функции Грина из 7.16.

7.19. Функция Грина имеет такой же вид, как и в предыдущей задаче, но теперь временная спиновая функция Грина в соответствующем выражении определяется результатом из 7.17.

7.20. Учитывая явный вид в. ф. Ψ_{nmp_z} (см. формулы (4)–(6) из 7.1), используемую при этом калибровку векторного потенциала $\mathbf{A} = [\mathcal{H}_0 \mathbf{r}]/2$ и выражение (VII. 5) для плотности тока заряженной бесспиновой частицы в магнитном поле, находим

$$j_\rho = 0, \quad j_z = \frac{ep_z}{\mu} |\Psi_{nmp_z}|^2, \quad j_\varphi = \left(\frac{e\hbar m}{\mu\rho} - \frac{e^2 \mathcal{H}_0 \rho}{2\mu c} \right) |\Psi_{nmp_z}|^2;$$

здесь использованы цилиндрические координаты. Подчеркнем, что $|\Psi|^2$ для рассматриваемых состояний зависит только от радиальной переменной ρ .

7.21. Волновые функции рассматриваемых состояний имеют вид

$$\Psi \equiv \Psi_{nmp_z s_z} = \Psi_{nmp_z} \chi_{s_z},$$

где χ_{s_z} — спиновые с. ф. оператора \hat{s}_z ; см. 7.9, а также предыдущую задачу. При этом

$$\mu_0 \Psi \hat{\sigma} \Psi = (0, 0, 2\mu_0 s_z |\Psi_{nmp_z}|^2).$$

Учитывая, что значение $|\Psi_{nmp_z}|^2$ зависит только от переменной ρ , согласно (VII.6) находим (в цилиндрических координатах) компоненты плотности тока, связанного со спиновым магнитным моментом частицы:

$$j_{\text{сп}, \rho} = j_{\text{сп}, z} = 0, \quad j_{\text{сп}, \varphi} = -2\mu_0 c s_z \frac{\partial}{\partial \rho} |\Psi_{nmp_z}|^2. \quad (2)$$

Результирующая плотность тока определяется суммой (2) и соответствующих компонент орбитального тока частицы из предыдущей задачи.

7.22. Согласно известной формуле классической электродинамики [27] имеем

$$\mathcal{H}(\mathbf{R}) = \frac{1}{c} \int \frac{[\mathbf{j}(\mathbf{r}), (\mathbf{R} - \mathbf{r})]}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^3} dV. \quad (1)$$

В отсутствие внешнего магнитного поля плотность тока определяется выражением (VII.5) с $\mathbf{A} = 0$. Для стационарных s -состояний в.ф. являются вещественными, так что $\mathbf{j} = 0$ и $\mathcal{H} = 0$.

Волновая функция наиболее общего $2p$ -состояния частицы имеет вид

$$\Psi_{2p} = (32\pi a^5)^{-1/2} (\varepsilon \mathbf{r}) e^{-r/2a}, \quad a = \hbar^2 / Ze^2 \mu, \quad |\varepsilon|^2 = 1$$

(по поводу угловой зависимости в.ф. см. 3.42). Согласно (1) и (VII.5) при $\mathbf{A} = 0$ получаем (заряд частицы обозначен через $-e$)

$$\mathcal{H}(0) = -\frac{ie\hbar}{64\pi\mu a^5 c} \int \frac{e^{-r/a}}{r} [\mathbf{r}, \varepsilon^* (\varepsilon \mathbf{r}) - \varepsilon (\varepsilon^* \mathbf{r})] dV \quad (2)$$

(заметим, что при вычислении тока следует действовать оператором ∇ лишь на множители $\varepsilon \mathbf{r}$ и $\varepsilon^* \mathbf{r}$ в в.ф., так как $[\mathbf{r}, \nabla f(r)] = 0$; $\nabla(\varepsilon \mathbf{r}) = \varepsilon$). Вводя вектор $\mathbf{b} = [\varepsilon^* \varepsilon]$, замечаем, что интеграл в выражении (2) принимает вид

$$\int \frac{1}{r^3} e^{-r/a} \{\mathbf{r}(\mathbf{r}\mathbf{b}) - br^2\} dV \equiv \mathbf{I}. \quad (3)$$

Для его вычисления рассмотрим сначала интеграл

$$\int \frac{1}{r^3} e^{-r/a} x_i x_k dV = C \delta_{ik}. \quad (4)$$

Выполнив здесь свертку по индексам i и k , получаем

$$3C = \int \frac{1}{r} e^{-r/a} dV = 4\pi a^2. \quad (5)$$

Из (3)—(5) следует значение $\mathbf{l} = -8\pi a^2 \mathbf{b}/3$ и окончательное выражение для магнитного поля «на ядре»

$$\mathcal{H}(0) = \frac{ieh}{24\mu\sigma a^3} [\boldsymbol{\varepsilon}^* \boldsymbol{\varepsilon}]. \quad (6)$$

Отсюда, используя явный вид векторов $\boldsymbol{\varepsilon}(m)$, см. 3.42, находим

$$\mathcal{H}(0)_{m=0} = 0, \quad \mathcal{H}(0)_{m=\pm 1} = (0, 0, \mp e\hbar/24\mu\sigma a^3). \quad (7)$$

Заметим в заключение, что если атомное ядро обладает магнитным моментом, то взаимодействие его с магнитным полем $\mathcal{H}(0)$ приводит к *сверхтонкому* расщеплению атомного уровня.

7.23. Волновая функция рассматриваемого состояния электрона имеет вид $\Psi = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a} \chi$, где χ — его спиновая функция, $a = \hbar^2 / Ze^2 \mu$. Плотность тока, связанного с орбитальным движением электрона, равна нулю, так что ток определяется спиновым магнитным моментом. Согласно (VII.6) имеем

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{сп}} = -\mu_0 c [\bar{\boldsymbol{\sigma}} \nabla \rho]; \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \chi^* \hat{\boldsymbol{\sigma}} \chi, \quad \rho(r) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a}.$$

Имея в виду выражение для векторного потенциала [27]

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}) = \frac{1}{c} \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}) dV}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = -\mu_0 \left[\bar{\boldsymbol{\sigma}}, \int \frac{\nabla \rho(r)}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} dV \right], \quad (1)$$

выполним в нем следующее преобразование:

$$\begin{aligned} \int \frac{\nabla \rho}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} dV &= \int \left\{ \nabla \frac{\rho(r)}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} - \rho \nabla \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \right\} dV = \\ &= \nabla_R \int \frac{\rho(r) dV}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \end{aligned} \quad (2)$$

(здесь использована теорема Остроградского — Гаусса и соотношение $\nabla_{\mathbf{r}} g(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \equiv -\nabla_{\mathbf{R}} g(\mathbf{R} - \mathbf{r})$). Входящий в (2) интеграл был вычислен в 4.6 и равен

$$\int \frac{\rho(r) dV}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = \frac{1}{R} - \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{a} \right) e^{-2R/a} \equiv f(R). \quad (3)$$

Таким образом, получаем $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\mu_0 [\bar{\boldsymbol{\sigma}} \nabla f(r)]$.

Приведем также предельные выражения для магнитного поля $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}$:

$$\mathcal{H}(0) = \frac{8\mu}{3a^3}, \quad \mathcal{H}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \frac{3(\mu \mathbf{r}) \mathbf{r} - \mu r^2}{r^5}; \quad \mu = \mu_0 \bar{\boldsymbol{\sigma}}$$

(на больших расстояниях это — поле магнитного диполя).

7.24. Исходим из формул (1), (2) предыдущей задачи:

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}) = -\mu_0 [\bar{\sigma} \nabla_{\mathbf{R}} f(R)], \quad f(R) = \int \frac{|\psi(\mathbf{r})|^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} dV, \quad (1)$$

где $\psi(\mathbf{r})$ — в. ф. рассматриваемого s -состояния. При этом магнитное поле ($\mu = \mu_0 \bar{\sigma}$)

$$\mathcal{H}(\mathbf{R}) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{R}) = -\mu \Delta f(R) + (\mu \nabla) \nabla f(R),$$

так что для его компонент имеем

$$\mathcal{H}_i(\mathbf{R}) = -\mu_k \left(\delta_{ik} \Delta - \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_k} \right) f(R). \quad (2)$$

Рассмотрим теперь выражение

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_k} f(R) \right|_{R=0} = C \delta_{ik}. \quad (3)$$

Выполнив в нем свертку по индексам i и k , получаем $3C = \Delta f(R)|_{R=0}$, а учтя явное выражение (1) для $f(R)$ и соотношение $\Delta \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = -4\pi \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r})$, находим $3C = -4\pi |\psi(0)|^2$.

С учетом этого значения, из формул (2) и (3) следует

$$\mathcal{H}(0) = \frac{8\pi}{3} \mu |\psi(0)|^2, \quad (4)$$

сравнить с предыдущей задачей, а также с результатом 7.22.

Г л а в а 8

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ. ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД. ВНЕЗАПНЫЕ И АДИАБАТИЧЕСКИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ

8.1. Собственные функции невозмущенного гамильтониана имеют вид $\Psi_n^{(0)} = \sqrt{2/a} \sin(\pi(n+1)x/a)$ (при $0 \leq x \leq a$). Заменяя в матричном элементе $\langle n | V(x) | n \rangle$ быстро осциллирующий при $n \gg 1$ квадрат синуса его средним значением, равным $1/2$, получаем¹⁾

$$E_n^{(1)} = \langle n | V(x) | n \rangle \approx \frac{1}{a} \int_0^a V(x) dx.$$

8.2. Возмущение $V = -e\mathcal{E}x$ и очевидно $E_n^{(1)} = 0$. Для вычисления поправки второго приближения согласно (VIII.1)

¹⁾ Состояния квантовых систем с $n \gg 1$ являются *квазиклассическими*. Теория возмущений для таких состояний рассмотрена в задачах 9.10—9.12.

воспользуемся известными значениями матричных элементов координаты осциллятора, см. (II.3). Учитывая также вид спектра $E_n^{(0)}$ невозмущенного осциллятора, получаем

$$E_n \approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega (n + 1/2) - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}, \quad (1)$$

так что поляризуемость для всех состояний осциллятора одинакова и равна $\beta_0 = e^2/m\omega^2$. Результат (1) совпадает с точным, см. 2.2. Поэтому представляется очевидным, что поправки третьего и более высоких порядков теории возмущений равны нулю.

8.3. Возмущение $V = -e\mathcal{E}x$. Используя вид с. ф. невозмущенного гамильтониана, см. 8.1, и симметричность $|\Psi_n^{(0)}(x)|^2$ относительно центра ямы, находим $\langle n|x|n \rangle = a/2$, так что в первом порядке теории возмущений для всех уровней $E_n^{(1)} = -e\mathcal{E}a/2$. Далее, вычислив матричный элемент координаты (для $n \neq 0$):

$$x_{0n} = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin \frac{\pi x}{a} \cdot \sin \frac{\pi(n+1)x}{a} dx = \frac{4((-1)^n - 1)(n+1)a}{\pi^2 n^2 (n+2)^2}$$

(он отличен от нуля лишь для нечетных значений n) и учтя вид невозмущенного энергетического спектра частицы в яме, см. 2.1, согласно (VIII.1) находим поправку второго приближения $E_0^{(2)} = -\beta_0 \mathcal{E}^2/2$, определяющую поляризуемость основного состояния

$$\beta_0 = \frac{1024}{\pi^6} \frac{ma^4 e^2}{\hbar^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k+1)^2}{(2k+1)^5 (2k+3)^5}. \quad (1)$$

Этот ряд быстро сходится и его значение определяется практически лишь первым членом, так что $\beta_0 \approx 4,39 \cdot 10^{-3} me^2 a^4 / \hbar^2$. Сделаем замечание по поводу числовой малости коэффициента здесь.

Естественная оценка для поляризуемости имеет вид $\beta \sim \sim e^2/m\omega^2$, где ω_0 — характерная частота (сравнить с поляризуемостью осциллятора из 8.2). В свою очередь, оценка для ω_0 следует из соотношения $\hbar\omega_0 = \Delta E$, где ΔE — расстояние до соседнего уровня (противоположной четности). В рассматриваемой задаче следует считать

$$\omega_0 = (E_1^{(0)} - E_0^{(0)})/\hbar = 3\pi^2 \hbar / 2ma^2,$$

при этом согласно (1) получаем $\beta_0 \approx 0,96 e^2 / m\omega_0^2$.

8.4. Собственные функции и спектр невозмущенного гамильтониана рассмотрены в 2.48 и имеют вид

$$\Psi_{n_1 n_2}^{(0)} = \Psi_{n_1}^{\text{осц}}(x) \cdot \Psi_{n_2}^{\text{осц}}(y), \quad E_{n_1 n_2}^{(0)} \equiv E_N^{(0)} = \hbar\omega(N+1), \quad (1)$$

$$N = n_1 + n_2 = 0, 1, 2, \dots$$

Сдвиг основного уровня в первом порядке теории возмущений отсутствует, $E_0^{(1)} = 0$. При вычислении поправки второго приближения согласно (VIII.1) под m теперь следует понимать набор из двух чисел (n_1, n_2) , определяющий невозмущенные с. ф. (1). Воспользовавшись известными значениями для матричных элементов координаты линейного осциллятора, см. (II.3), находим, что $\langle n_1 n_2 | V | 00 \rangle$ отлично от нуля лишь при $n_1 = n_2 = 1$, причем $\langle 11 | V | 00 \rangle = \alpha\hbar/2m\omega$, и получаем $E_0^{(2)} = -\alpha^2\hbar/8m^2\omega^3$. Условие применимости теории возмущений (VIII.3) в рассматриваемой задаче принимает вид $|\alpha| \ll m\omega^2 = k$.

Согласно 2.49 точное значение энергии основного состояния $E_0 = \hbar\omega [\sqrt{1 + \alpha/k} + \sqrt{1 - \alpha/k}]/2$. Разложение его по параметру α/k соответствует ряду теории возмущений. Как видно, в случае $|\alpha/k| \ll 1$, соответствующем применимости теории возмущений, ряд быстро сходится. При $|\alpha/k| \geq 1$ в рассматриваемой задаче уже не возникает квантования энергетического спектра, а ряд теории возмущений оказывается расходящимся.

8.5. а) Невозмущенный уровень осциллятора с $N = 1$ является двукратно вырожденным. Отвечающие ему невозмущенные с. ф. $\Psi_{n_1 n_2}^{(0)}$, см. предыдущую задачу, обозначим как $\Psi_1^{(0)} \equiv \Psi_{10}^{(0)}$ и $\Psi_2^{(0)} \equiv \Psi_{01}^{(0)}$. Матричные элементы возмущения с такими с. ф. с учетом (II.3) равны: $V_{11} = V_{22} = 0$, $V_{12} = V_{21} = \alpha\hbar/2m\omega$. Секулярное уравнение (VIII.5) и его решение имеют вид

$$\begin{vmatrix} -E_1^{(1)} & \alpha\hbar/2m\omega \\ \alpha\hbar/2m\omega & -E_1^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad E_{1,1(2)}^{(1)} = \mp \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}, \quad (1)$$

так что вырождение уровня снимается. Правильные функции нулевого приближения $\Psi_{1,1(2)}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} \mp \Psi_2^{(0)})/\sqrt{2}$.

б) Этот уровень с $N = 2$ трехкратно вырожден. Ему отвечают с. ф. $\Psi_1^{(0)} \equiv \Psi_{20}^{(0)}$, $\Psi_2^{(0)} \equiv \Psi_{11}^{(0)}$, $\Psi_3^{(0)} \equiv \Psi_{02}^{(0)}$. Отличные от нуля матричные элементы возмущения равны: $V_{12} = V_{21} = V_{23} = V_{32} = \alpha\hbar/\sqrt{2}m\omega$. Решение секулярного уравнения дает следующие значения поправок первого порядка:

$$E_{2,1}^{(1)} = -\alpha\hbar/m\omega, \quad E_{2,2}^{(1)} = 0, \quad E_{2,3}^{(1)} = \alpha\hbar/m\omega, \quad (2)$$

так что уровень расщепляется на три подуровня и вырождение полностью снимается. Отвечающие расщепленным уровням (2) правильные функции нулевого приближения имеют вид

$$\Psi_{2,1}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} \mp \sqrt{2} \Psi_2^{(0)} + \Psi_3^{(0)})/2, \quad \Psi_{2,2}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} - \Psi_2^{(0)})/\sqrt{2}.$$

Читателю предлагается сравнить полученные по теории возмущений результаты с точным решением, см. 2.49.

8.6. Сдвиги уровней в первых двух порядках теории возмущений равны:

$$E_1^{(1)} = V_{11}, \quad E_2^{(1)} = V_{22}, \quad E_1^{(2)} = -E_2^{(2)} = \frac{|V_{12}|^2}{\epsilon_1 - \epsilon_2}. \quad (1)$$

Условие применимости: $|V_{11}|, |V_{22}|, |V_{12}| \ll \epsilon_2 - \epsilon_1$.

Эти результаты полезно сравнить с точным решением задачи, состоящим в диагонализации оператора (матрицы)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 + V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & \epsilon_2 + V_{22} \end{pmatrix}.$$

Эта матрица является гамильтонианом возмущенной двухуровневой системы в энергетическом представлении для невозмущенного гамильтониана. Ее с. з. равны²⁾

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} [\epsilon_1 + \epsilon_2 + V_{11} + V_{22} \mp \sqrt{(\epsilon_1 - \epsilon_2 + V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}]. \quad (2)$$

В условиях отмеченной выше малости матричных элементов V_{ab} разложение в (2) радикала по степеням параметра $\sim V/(\epsilon_2 - \epsilon_1)$ соответствует ряду теории возмущений для невырожденных уровней, первые члены которого совпадают, естественно, с выражениями (1). С другой стороны, в случае $\epsilon_1 = \epsilon_2$ результат (2) непосредственно следует из секулярного уравнения (VIII.5) для двукратно вырожденного уровня. Соответственно при $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$ формула (2) дает обобщение теории возмущений на случай двух близко расположенных уровней, взаимодействие которых друг с другом учитывается точно, а взаимодействием их с остальными уровнями системы пренебрегается.

8.7. Рассмотрим значения параметра λ , близкие к некоторому λ_0 , и запишем гамильтониан в виде

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}(\lambda_0) + (\lambda - \lambda_0) \hat{W}.$$

Используя при $\lambda \rightarrow \lambda_0$ теорию возмущений, находим

$$E_0(\lambda) = E_0(\lambda_0) + A(\lambda_0)(\lambda - \lambda_0) + B(\lambda_0)(\lambda - \lambda_0)^2 + \dots,$$

²⁾ Сравнить с 6.9.

при этом $B(\lambda_0) < 0$, так как поправка второго приближения к основному уровню всегда отрицательна. Отсюда и следует утверждение задачи, так как

$$d^2 E_0(\lambda)/d\lambda^2 = 2B(\lambda) < 0.$$

Проиллюстрируем установленное свойство *выпуклости* зависимости $E_0(\lambda)$ от параметра λ на примере линейного осциллятора. Для него $H = p^2/2m + kx^2/2$ и $E_0 = \hbar\omega/2$, где $\omega = \sqrt{k/m}$. В роли параметра λ можно выбрать $\lambda = k$ и непосредственным дифференцированием убедиться в выполнении неравенства $E_0'' < 0$. Аналогично можно рассмотреть и случай кулоновского потенциала.

8.8. Для невозмущенного ротатора имеем, см. 3.1:

$$\Psi_m^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1)$$

Возмущение $V = -d\mathcal{E} = -d\mathcal{E} \cos \varphi$. Воспользовавшись формулой $\cos \varphi = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2$, находим, что матричные элементы $V_{mm'}$ отличны от нуля лишь для значений $m' = m \pm 1$ и равны при этом $-d\mathcal{E}/2$. Теперь согласно (VIII.1) и (1) получаем для основного уровня ротатора

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -d^2 I e^2 / \hbar^2. \quad (2)$$

Соответственно поляризуемость основного состояния ротатора $\beta_0 = 2d^2 I / \hbar^2$, сравнить с 8.2 и 8.3.

8.9. Хотя возбужденные уровни ротатора являются двукратно вырожденными, для расчета их сдвигов в однородном электрическом поле можно использовать теорию возмущений для невырожденных уровней, если заметить следующее. Возмущение $V = -d\mathcal{E} \cos \varphi$, как и гамильтониан H_0 , инвариантны при отражении координат относительно оси, направленной вдоль электрического поля, т. е. при преобразовании $\varphi \rightarrow -\varphi$. Следствием этого является возможность классифицировать с. ф. гамильтониана по значению $P = \pm 1$ четности и рассматривать соответствующие состояния раздельно. При этом сразу определяется система правильных с. ф. нулевого приближения (сравнить с 8.8):

$$\Psi_{\mu,+}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos \mu\varphi, \quad \Psi_{\mu,-}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin \mu\varphi,$$

$$E_{\mu,\pm}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \mu^2}{2I}, \quad \mu = |m| = 1, 2, \dots$$

и $\Psi_{0,+}^{(0)} = 1/\sqrt{2\pi}$, $E_{0,+}^{(0)} = 0$ для $\mu = 0$.

Начнем с расчета сдвигов *четных уровней*. Для них находим, что отличны от нуля лишь следующие матричные элементы

возмущения:

$$V_{\mu+, \mu'+} = \begin{cases} -d\mathcal{E}/2; & \mu' = \mu \pm 1, \quad \mu' \neq 0, \quad \mu \neq 0, \\ -d\mathcal{E}/\sqrt{2}; & \mu' = 1, \quad \mu = 0 \text{ или } \mu' = 0, \quad \mu = 1, \end{cases}$$

и по формулам (VIII. 1) получаем

$$E_{\mu, +}^{(1)} = 0; \quad E_{1, +}^{(2)} = \frac{5d^2 I \mathcal{E}^2}{6\hbar^2}, \quad E_{\mu, +}^{(2)} = \frac{d^2 I \mathcal{E}^2}{(4\mu^2 - 1)\hbar^2} \quad (1)$$

для $\mu \geq 2$.

Для нечетных уровней $V_{\mu-, \mu'-} = -d\mathcal{E}/2$ при $\mu' = \mu \pm 1$ (остальные матричные элементы равны нулю), и их сдвиги равны

$$E_{\mu, -}^{(1)} = 0; \quad E_{1, -}^{(2)} = -\frac{d^2 I \mathcal{E}^2}{6\hbar^2}, \quad E_{\mu, -}^{(2)} = \frac{d^2 I \mathcal{E}^2}{(4\mu^2 - 1)\hbar^2} \quad (2)$$

для $\mu \geq 2$.

Из сравнения выражений (1) и (2) следует, что во втором порядке теории возмущений уровень ротатора с $|m|=1$ расщепляется и вырождение снимается, а при значениях $|m| \geq 2$ происходит лишь сдвиг уровня (его расщепление возникает в $2|m|$ -м порядке теории возмущений).

8.10. С. ф. и с. з. гамильтониана невозмущенного ротатора имеют вид (см. 3.2)

$$\Psi_{lm}^{(0)} = Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad E_{lm}^{(0)} = E_l^{(0)} = \hbar^2 l(l+1)/2I, \quad (1)$$

а возмущение $V = -d\mathcal{E} \cos \theta$ (ось z направлена вдоль электрического поля). Учитывая соотношение $\cos \theta \cdot Y_{00} = -iY_{10}/\sqrt{3}$, см. (III. 7), и ортогональность шаровых функций, находим, что матричный элемент возмущения $V_{lm, 00}$ отличен от нуля лишь при $l=1, m=0$ и равен $V_{10, 00} = i d\mathcal{E}/\sqrt{3}$. Согласно (VIII. 1) получаем

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -\frac{Id^2 \mathcal{E}^2}{3\hbar^2}, \quad (2)$$

так что поляризуемость основного состояния ротатора равна $\beta_0 = 2Id^2/3\hbar^2$.

8.11. Для вычисления матричных элементов возмущения (см. предыдущую задачу) воспользуемся соотношением

$$\begin{aligned} \cos \theta \cdot Y_{lm} &= a_{lm} Y_{l+1, m} - a_{l-1, m} Y_{l-1, m}, \\ a_{lm} &= -i \sqrt{(l+m+1)(l-m+1)/(2l+1)(2l+3)} \end{aligned} \quad (1)$$

(для его получения следует учесть связь шаровых функций Y_{lm} с присоединенными полиномами Лежандра P_l^m и воспользо-

ваться рекуррентными соотношениями для последних; фазовый множитель у Y_{lm} , см. (III.5), выбран как в книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица [1]). Согласно (1) отличны от нуля только матричные элементы возмущения

$$V_{l+1 m, l m} = -V_{l m, l+1 m} = -d\mathcal{E}a_{lm}.$$

Хотя уровни энергии невозмущенного ротатора вырождены (по проекции момента m при $l \neq 0$), для расчета их сдвига и расщепления в электрическом поле нет необходимости применять теорию возмущений для вырожденных уровней. Ввиду сохранения l_z и при действии возмущения, состояния с различными значениями m можно рассматривать отдельно по формулам теории возмущений без вырождения. С учетом этого замечания по формулам (VIII.1) получаем: $E_{lm}^{(1)} = 0$ и

$$E_{lm}^{(2)} = \frac{Id^2\mathcal{E}^2}{\hbar^2} \cdot \frac{l(l+1) - 3m^2}{l(l+1)(2l-1)(2l+3)}. \quad (2)$$

Как видно, $(2l+1)$ -кратное вырождение невозмущенного уровня ротатора частично снимается: он расщепляется на $l+1$ подуровней, из которых один, с $m=0$, является невырожденным, а остальные l — двукратно вырожденными по знаку проекции момента на направление электрического поля. Дальнейшего снятия вырождения в более высоких порядках теории возмущений не происходит. Это связано с тем, что, с одной стороны, величина $m \equiv l_z$ является интегралом движения и может иметь определенное значение одновременно с энергией, а с другой стороны, энергия состояний, различающихся лишь знаком проекции момента на направление электрического поля, одинакова в силу инвариантности гамильтониана относительно зеркального отражения координат в любой плоскости, проходящей через ось z (при таком преобразовании энергия не изменяется, а проекция аксиального вектора (момент импульса) на направление полярного вектора (электрическое поле) меняет знак).

8.12. Для основного уровня частицы в δ -потенциале имеем (см. 2.7):

$$E_0^{(0)} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad \Psi_0^{(0)} = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|y|}, \quad \alpha = \frac{ma}{\hbar^2}.$$

Для вычисления его сдвига под действием возмущения $V = -e\mathcal{E}x$ во втором порядке (очевидно $E_0^{(1)} = 0$) в качестве невозмущенных с.ф. непрерывного спектра удобно выбрать функции $\Psi_{kl}^{(0)}(x)$, отвечающие определенной четности $l = \pm 1$. Так как для четных с.ф. гамильтониана, искажаемых δ -потенциалом, матричный элемент возмущения равен нулю (и поэтому

их явный вид несуществен), а нечетные в. ф. не искажаются δ -потенциалом и поэтому совпадают с в. ф. $\Psi_{k,-1}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin kx$ свободной частицы, то согласно (VIII.1) имеем ($E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$):

$$E_0^{(2)} \equiv -\frac{1}{2} \beta_0 \mathcal{E}^2 = \sum_I \int_0^\infty \frac{|\langle kI | e^{\mathcal{E}x} | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k} dk =$$

$$= -\frac{2m\kappa e^2 \mathcal{E}^2}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \frac{dk}{\kappa^2 + k^2} \left| \int_{-\infty}^\infty x \sin kx \cdot e^{-\kappa|x|} dx \right|^2.$$

Используя здесь значения интегралов

$$\int_{-\infty}^\infty x \sin kx \cdot e^{-\kappa|x|} dx = \frac{4\kappa k}{(\kappa^2 + k^2)^2}$$

и (Д1.5), находим сдвиг уровня и поляризуемость

$$U(\varphi) \uparrow U = -d\mathcal{E}_0 \left(1 - \frac{\varphi^2}{2}\right) \quad E_0^{(2)} = -\frac{1}{2} \beta_0 \mathcal{E}^2, \quad \beta_0 = 5me^2 / 4\hbar^2 \kappa^4,$$

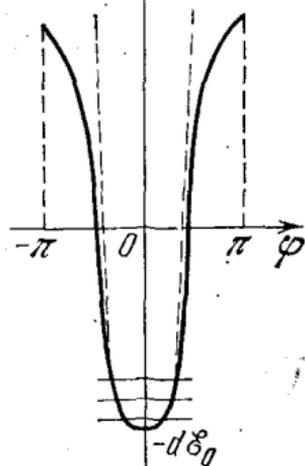


Рис. 34

сравнить с 6.36.

8.13. В сильном электрическом поле в. ф. нижних уровней ротатора локализованы в области малых углов $|\varphi| \ll 1$, так как потенциальная энергия $U = -d\mathcal{E} \cos \varphi$ имеет глубокий минимум при $\varphi = 0$, см. рис. 34. Разлагая $U(\varphi)$ в ряд и ограничиваясь первыми членами разложения:

$$U = -d\mathcal{E} \cos \varphi \approx -d\mathcal{E} + d\mathcal{E} \varphi^2 / 2, \quad |\varphi| \ll 1, \quad (1)$$

приводим в нулевом приближении гамильтониан ротатора к гамильтониану линейного осциллятора и воспользовавшись (II.3), получаем

$$E_n^{(0)} = -d\mathcal{E} + \hbar \sqrt{\frac{d\mathcal{E}}{I}} \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\Psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2^n} \sqrt{\pi} \varphi_0 n!} \exp\left(-\frac{\varphi^2}{2\varphi_0^2}\right) H_n\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right), \quad (2)$$

$$\varphi_0 = \left(\frac{\hbar^2}{I d\mathcal{E}}\right)^{1/4}.$$

Условие применимости проведенного рассмотрения состоит в малости с. ф. (2) при $|\varphi| \sim 1$. Так как в. ф. $\Psi_n^{(0)}(\varphi)$ существенно отличны от нуля лишь в области углов (доступных классическому ротатору)

$$d\mathcal{E} \varphi^2/2 \leq E_n^{(0)} + d\mathcal{E}, \quad \text{или} \quad \varphi^2 \leq \varphi_0^2 (n + 1/2),$$

то отмеченное условие принимает вид $\mathcal{E} \gg \hbar^2 (n + 1/2)^2 / dI$.

Заметим в заключение, что взяв в (1) следующие члены разложения по φ^2 (ангармонические поправки), можно уточнить значение E_n в (2).

8.14. Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2I} \hat{l}^2 - d\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2I} \Delta_{\theta, \varphi} - d\mathcal{E} \cos \theta \quad (1)$$

(полярная ось z направлена вдоль электрического поля \mathcal{E}).

В случае сильного поля с. ф. гамильтониана для нижних уровней локализованы при малых значениях угла $\theta \ll 1$ из-за глубокого минимума при $\theta_0 = 0$ у потенциальной энергии $U = -d\mathcal{E} \cos \theta$, сравнить с предыдущей задачей. Учитывая это обстоятельство, а также тот факт, что оператор $\Delta_{\theta, \varphi}$ — лапласиан на сфере единичного радиуса — при малых углах θ можно рассматривать как лапласиан в плоском двумерном пространстве (в плоскости, касательной к сфере радиуса $R = 1$ в точке $\theta_0 = 0$, так что при этом θ является «радиальной» переменной), гамильтониан (1) можно приближенно записать в виде

$$\hat{H} \approx -\frac{\hbar^2}{2I} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - d\mathcal{E} + \frac{1}{2} d\mathcal{E} (x^2 + y^2). \quad (2)$$

Здесь $x = \theta \cos \varphi$, $y = \theta \sin \varphi$, $\theta = \sqrt{x^2 + y^2}$.

Гамильтониан (2) описывает плоский осциллятор, что позволяет, воспользовавшись 2.48, получить в нулевом приближении спектр и собственные функции исходного гамильтониана (1):

$$E_N^{(0)} = -d\mathcal{E} + \hbar\omega (N + 1), \quad \omega = (d\mathcal{E}/I)^{1/2}, \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

$$\Psi_{n_1 n_2}^{(0)} = C_{n_1} C_{n_2} \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\theta_0^2}\right) H_{n_1}\left(\frac{x}{\theta_0}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{\theta_0}\right), \quad (3)$$

$$n_1 + n_2 = N,$$

где $\theta_0 = (\hbar^2 / Id\mathcal{E})^{1/4}$. Так как с. ф. осциллятора (2) локализованы в области $\theta^2 \leq (N + 1)\theta_0^2$, то использованное выше условие $\theta \ll 1$ определяет условие применимости (3) в виде $\theta_0^2 \ll \ll (N + 1)^{-1}$, или $\mathcal{E} \gg \hbar^2 (N + 1)^2 / dI$.

В рассматриваемом приближении уровень $E_N^{(0)}$ имеет кратность вырождения $g(N) = N + 1$. Такое вырождение — свойство принятого приближения. Учтя в разложении $\cos \theta$ следующий, $\sim \theta^4$, член, а также используя более точное выражение для $\Delta_{\theta, \varphi}$, можно уточнить (3), определив малое расщепление уровней $E_N^{(0)}$.

8.15. При $r \ll a$ рассматриваемые потенциалы имеют вид $U \approx -U_0 a/r$. В таком кулоновском поле в.ф. нижних энергетических уровней локализованы на расстоянии порядка $r_n \sim a_0 n^2$ от центра поля; здесь $a_0 \approx \hbar^2 / m a U_0$, n — главное квантовое число. Если $r_n \ll a$ (т. е. $\xi \equiv m a^2 U_0 / \hbar^2 \gg n^2$), то, очевидно, в нулевом приближении искомые уровни нижней части спектра и соответствующие им с.ф. будут такие же, как и в кулоновском поле:

$$E_{n_r l}^{(0)} = -\frac{m a^2 U_0^2}{2 \hbar^2 n^2}, \quad \Psi_{n_r l m}^{(0)} = \Psi_{n_r l m}^{\text{кул}}, \quad (1)$$

см. (IV.3). При этом отличие рассматриваемых потенциалов от кулоновского играет роль возмущения $V(r) = U(r) + U_0 a/r$. Ввиду того что орбитальный момент частицы является интегралом движения и при действии возмущения, с.ф. (1) являются *правильными* функциями нулевого приближения и поправка первого порядка определяется выражением

$$E_{n_r l}^{(1)} = \int V(r) |\Psi_{n_r l m}^{(0)}|^2 d^3 r. \quad (2)$$

а) Разлагая потенциал возмущения в ряд по степеням r/a , что дает

$$V(r) = -U_0 (-1/2 + r/12a + O(r^3/a^3)), \quad (3)$$

и учитывая значение интеграла (см. [1, § 36])

$$\int r |\Psi_{n_r l m}^{(0)}|^2 d^3 r = \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)] \frac{\hbar^2}{m a U_0}, \quad (4)$$

согласно (2)–(4) находим

$$E_{n_r l}^{(1)} = U_0 \left\{ \frac{1}{2} - \frac{3n^2 - l(l+1)}{24\xi} \right\}, \quad n = n_r + l + 1 \quad (5)$$

(заметим, что учет в разложении (3) слагаемого $\sim r^3/a^3$ был бы превышением точности, так как его вклад в сдвиг уровня $\sim U_0/\xi^3$ имеет такой же порядок величины, как и поправка второго приближения теории возмущений).

б) Теперь $V \approx U_0(1 - r/2a + r^2/6a^2)$ и

$$E_{n_r l}^{(1)} = U_0 \left\{ 1 - \frac{3n^2 - l(l+1)}{4\xi} + \frac{n^2}{12\xi^2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \right\}. \quad (6)$$

Как видно из (5) и (6), случайное кулоновское вырождение уровней по l снимается.

Заметим, что для потенциала Хюльтена у. Ш. для s -состояний допускает точное решение, см. 4.8. При этом (для $l = 0$) $E_{n_r 0}^{(0)}$ совместно с (5) описывают точный результат.

8.16. У. Ш. для радиальной части, $\chi = rR$, с. ф. гамильтониана имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi'' - \frac{\alpha}{r^\nu} \chi + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \chi = E_{n_r l} \chi.$$

Эффективная потенциальная энергия в этом уравнении

$$U_{\text{эф}} = -\frac{\alpha}{r^\nu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

имеет минимум в точке

$$r_0 = \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\alpha \nu m} \right]^{1/(2-\nu)}.$$

В случае $\nu < 2$ и значениях момента частицы $l \rightarrow \infty$ для нижних радиальных состояний область локализации в. ф. вблизи этой точки минимума (при этом $r_0 \rightarrow \infty$) существенно уже области, в которой можно ограничиться первыми членами разложения эффективного потенциала

$$U_{\text{эф}} = -\frac{1}{2} \alpha (2-\nu) r_0^{-\nu} + \frac{1}{2} \alpha (2\nu - \nu^2) r_0^{-(\nu+2)} (r-r_0)^2 + \dots \quad (1)$$

(сравнить с предыдущими задачами 8.13—8.15). Поэтому в нулевом приближении мы приходим фактически к задаче о гармоническом осцилляторе с точкой равновесия $r = r_0$ и упругостью $k = U''_{\text{эф}}(r_0)$, что позволяет получить³⁾ (сравнить с (II.2))

$$\chi_{n_r l}^{(0)} = \left(2^n n_r! \sqrt{\pi} n_r! \right)^{-1/2} \exp \left[-\frac{(r-r_0)^2}{2a^2} \right] H_{n_r} \left(\frac{r-r_0}{a} \right), \quad (2)$$

$$E_{n_r l}^{(0)} = -\frac{1}{2} \alpha (2-\nu) r_0^{-\nu} + \hbar \sqrt{\frac{\alpha (2\nu - \nu^2)}{m}} r_0^{-2-\nu} \left(n_r + \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

здесь $a = (\hbar^2 r_0^{2+\nu} / m \alpha (2\nu - \nu^2))^{1/4}$.

Для применимости полученных результатов требуется выполнение использованного при их выводе условия: радиальная функция (2) должна быть локализована на расстояниях $|r - r_0| \ll r_0$.

³⁾ Учет следующих членов в разложении (1) (ангармонических поправок) позволяет с помощью теории возмущений уточнить этот результат.

Отсюда следует, что $l \gg \left(n_r + \frac{1}{2}\right) / \sqrt{2-v}$ (сравнить с 8.13 и 8.14).

Проиллюстрируем полученный результат на примере частицы в кулоновском потенциале, т. е. для $v = 1$; при этом $E_n = -m\alpha^2/2\hbar^2 n^2$. Записав $n = l + 1/2 + n_r + 1/2$ и выполнив разложение

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(l + 1/2 + n_r + 1/2)^2} \approx -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 (l + 1/2)^2} + \frac{m\alpha^2}{\hbar^2 (l + 1/2)^3} \left(n_r + \frac{1}{2}\right), \quad (4)$$

замечаем, что результат (3) представляет первые два члена разложения (4) для E_n по малому параметру $(n_r + 1/2)/(l + 1/2)$ (при этом следует учесть, что $l(l + 1) \approx (l + 1/2)^2$ ввиду $l \gg 1$).

8.17. Решение данной задачи получается заменой $-\alpha$ на α и $-v$ на v в формулах предыдущей задачи (теперь $E_{n_r l} > 0$ и ограничений на значения $v > 0$ не возникает).

В случае сферического осциллятора точный спектр $E_N = \hbar\omega(N + 3/2)$, где $N = 2n_r + l$ (см. 4.5) и $\omega = \sqrt{2\alpha/m}$. Формула (3) из предыдущей задачи воспроизводит этот спектр с единственным отличием: заменой $l + 1/2$ на $\sqrt{l(l + 1)}$ (несущественным ввиду $l \gg 1$).

8.18. Замена переменных $x' = x$, $y' = y$, $z' = az/b$ приводит у. Ш. и граничное условие для с. ф. гамильтониана к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{a^2}{b^2} \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right) \Psi = E\Psi, \quad \Psi(r' = a) = 0.$$

Так как по условию $|a - b| \ll a$, то, записав $a = (1 + \epsilon)b$, где $|\epsilon| \ll 1$, представим гамильтониан в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, выбрав

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta', \quad \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} (2\epsilon + \epsilon^2) \frac{\partial^2}{\partial z'^2}. \quad (1)$$

При этом \hat{V} выступает как оператор возмущения.

Для основного состояния невозмущенного гамильтониана имеем (сравнить с 4.1)

$$\Psi_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \sin \frac{\pi r}{a}, \quad r \leq a; \quad E_0^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (2)$$

(здесь и ниже для упрощения записи штрихи у переменных опущены).

Расчет поправки первого порядка по малому параметру ϵ согласно (1) сводится к вычислению среднего значения $\overline{\partial^2/\partial z'^2}$

для основного состояния. Ввиду сферической симметрии его в. ф. имеем, очевидно,

$$\frac{\overline{\partial^2}}{\partial x^2} = \frac{\overline{\partial^2}}{\partial y^2} = \frac{\overline{\partial^2}}{\partial z^2} = \frac{1}{3} \overline{\Delta}.$$

Отсюда с учетом выражений (1), (2) следует

$$E_0^{(1)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 \epsilon}{3ma^2}, \quad E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \left(1 + \frac{2\epsilon}{3}\right) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (3)$$

Так как объем эллипсоида равен

$$\frac{4\pi}{3} a^2 b \approx \frac{4\pi}{3} a^3 (1 - \epsilon) \equiv \frac{4\pi}{3} R^3,$$

то согласно (3) замечаем, что $E_0 \approx \pi^2 \hbar^2 / 2mR^2$, здесь R — радиус шара такого же объема, как и у эллипсоида. Таким образом, в первом порядке по параметру деформации ϵ энергия основного уровня определяется лишь объемом эллипсоида. Имея в виду, что в s -состояниях частица оказывает одинаковое по всей поверхности давление на стенки сферической ямы, а также выражение для совершаемой работы, $-P dV$, при изменении объема, легко сообразить, что этот результат остается справедливым при малых деформациях поверхности достаточно произвольного вида, сохраняющих объем.

8.19. Задача решается аналогично предыдущей. Теперь

$$\Psi_{n_r l m}^{(0)} = \frac{\tilde{C}}{\sqrt{r}} J_{l+1/2} \left(\alpha_{n_r+1, l} \frac{r}{a} \right) Y_{lm}, \quad E_{n_r l}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \alpha_{n_r+1, l}^2}{2\mu a^2},$$

см. 4.9; невозмущенный уровень $(2l+1)$ -кратно вырожден. Ввиду сохранения l_z приведенные в. ф. являются правильными функциями нулевого приближения для возмущенного гамильтониана, так что сдвиги уровней

$$E_{n_r l m}^{(1)} = - \frac{\epsilon \hbar^2}{\mu} \int \Psi_{n_r l m}^{(0)*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_{n_r l m}^{(0)} dv. \quad (1)$$

Для вычисления здесь интеграла рассмотрим сначала более общий матричный элемент вида

$$\langle n_r l m' | \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} | n_r l m \rangle.$$

После выполнения в нем интегрирования по координатам он принимает вид $\langle m' | \hat{T}_{ik} | m \rangle$, где \hat{T}_{ik} является уже обычной матрицей, действующей в пространстве векторов состояний момента величины l , в котором векторы $|m\rangle$ определяют базис. Из

соображений о тензорном характере оператора T_{ik} следует (сравнить с 3.40, \hat{l}_i — матрицы-векторы компонент момента):

$$\hat{T}_{ik} = A\delta_{ik} + B\epsilon_{ikl}\hat{l}_l + C(\hat{l}_i\hat{l}_k + \hat{l}_k\hat{l}_i). \quad (2)$$

Ввиду симметричности T_{ik} имеем $B = 0$. Далее, из условия

$$\hat{l}_i\hat{T}_{ik} = \hat{l}_i\overline{\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_k}} \equiv 0$$

следует соотношение

$$A + [2l(l+1) - 1]C = 0. \quad (3)$$

Наконец, свертка в (2) по индексам i и k дает

$$3A + 2l(l+1)C = \hat{T}_{ii} = \bar{\Delta}. \quad (4)$$

Определяя из (3) и (4) значения A и C , а также учитывая, что $-(\hbar^2/2\mu)\bar{\Delta} = E_{n_r l}^{(0)}$, получаем

$$E_{n_r l m}^{(1)} = 2\epsilon \frac{2l^2 + 2l - 1 - 2m^2}{(2l-1)(2l+3)} E_{n_r l}^{(0)}. \quad (5)$$

Отсюда следует, что вырождение уровня частично снимается: он расщепляется на $l+1$ подуровней, из которых один (с $m=0$) является невырожденным, а остальные (с $m = \pm|m|$) двукратно вырождены. В более высоких порядках теории возмущений дальнейшего снятия вырождения, очевидно, не происходит.

Заметим, что среднее по всем подуровням значение поправки первого порядка равно

$$\overline{E_{n_r l m}^{(1)}} = \frac{1}{2l+1} \sum_m E_{n_r l m}^{(1)} = \frac{2\epsilon}{3} E_{n_r l}^{(0)}$$

(о вычислении суммы см. 3.3), так что значение $\bar{E}_{n_r l m}$, как и в случае основного состояния, определяется только объемом эллипсоида (см. по этому поводу замечание в предыдущей задаче).

8.20. Уравнение $\hat{l}^2\Psi_{Lm} = L^2\Psi_{Lm}$ с помощью подстановки

$$\Psi_{Lm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi \sin \theta}} e^{im\varphi} \chi(\theta)$$

принимает вид одномерного уравнения Шрёдингера

$$\chi'' + \left[L^2 + \frac{1}{4} - \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2 \theta} \right] \chi = 0 \quad (1)$$

с $\hbar = 1$, «массой» $\mu = 1/2$, «потенциальной энергией» $U(\theta) = (m^2 - 1/4)/\sin^2 \theta$ и «энергией», равной $L^2 + 1/4$. В случае $m^2 \gg 1$ «потенциал» имеет глубокий минимум при значении $\theta = \pi/2$ и в. ф. нижних «уровней» локализованы вблизи этой точки. Разлагая $U(\theta)$ в ряд

$$U(\theta) = \left(m^2 - \frac{1}{4}\right) \left[1 + \left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)^2 + \frac{2}{3} \left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)^4 + \dots\right], \quad (2)$$

замечаем, что рассматриваемая задача сводится к у. Ш. для линейного осциллятора. В нулевом приближении, опуская в (2) слагаемое $\sim (\theta - \pi/2)^4$, получаем (положено $x = \theta - \pi/2$):

$$\chi_n^{(0)} = C \frac{|m|^{1/4}}{\sqrt{2^n} \sqrt{\pi} n!} e^{-|m|x^2/2} H_n(\sqrt{|m|x}), \quad (3)$$

$$(L_n^2)^{(0)} = m^2 + 2|m| \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

здесь C — фазовый множитель, см. ниже; в волновой функции и в выражении для L_n^2 опущены члены порядка $1/|m|$.

Для уточнения значения L^2 найдем следующую поправку, соответствующую учету в (2) ангармоничности $\sim (\theta - \pi/2)^4$. Она оказывается равной

$$(L_n^2)^{(1)} = \frac{2m^2}{3} \overline{\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)^4} = n^2 + n + \frac{1}{2}$$

(сравнить с [1, с. 166]), и прибавив ее к значению нулевого приближения из (3), замечаем, что получающийся результат

$$L^2 = (L_n^2)^{(0)} + (L_n^2)^{(1)} = (|m| + n)(|m| + n + 1) \quad (4)$$

воспроизводит точное значение $L^2 = l(l+1)$ с $l = |m| + n$.

Отметим, что условие локализации в. ф. (3) в области углов $|\theta - \pi/2| \ll 1$, использованное при решении задачи, требует, чтобы $n \ll |m|$, $|m| \gg 1$ (сравнить с 8.13). Наконец, как известно, фазовый множитель у шаровых функций фиксируется определенным условием, см. (III.8), (III.5). В соответствии с ним в (3) следует выбрать

$$C = i^l (-1)^{(m+|m|)/2}.$$

8.21. Вычислим среднюю энергию $\bar{E}(\alpha)$ и найдем ее минимальное значение $\min \bar{E} \equiv \bar{E}(\alpha_0)$. В соответствии с основной идеей вариационного метода его можно рассматривать как некоторое приближенное значение энергии основного состояния E_0 , вар $= \bar{E}(\alpha_0)$. Так как используемые пробные функции отражают характерные свойства точной в. ф. основного состояния

$\Psi_0(x)$, очевидные из общих соображений: 1) условие $\Psi_0(x) \propto x$ при $x \rightarrow 0$, 2) быстрое (экспоненциальное) убывание на больших расстояниях, 3) отсутствие нулей (не считая граничных), 4) ее плавный монотонный характер по разные стороны от экстремальной точки, то следует ожидать, что отличие $E_{0, \text{вар}}$ от точного значения E_0 не будет слишком большим⁴⁾.

При вычислении среднего значения $\bar{E} = \bar{T} + \bar{U}$ удобно, проинтегрировав пробную в. ф., воспользоваться соотношением

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\Psi'(x)|^2 dx$$

и учесть значение интеграла (Д1.6).

а) Из условия нормировки в. ф. имеем $A^2 = 4\alpha^3$; далее находим

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad \bar{U} = \frac{3F_0}{2\alpha}.$$

Минимизация $\bar{E}(\alpha)$ дает

$$E_{0, \text{вар}} = \left(\frac{243}{32}\right)^{1/3} \left(\frac{\hbar^2 F_0^2}{m}\right)^{1/3} \approx 1,966 \left(\frac{\hbar^2 F_0^2}{m}\right)^{1/3}. \quad (1)$$

б) Аналогичным образом получаем

$$B^2 = 4 \sqrt{\alpha^3/\pi}, \quad \bar{T} = 3\hbar^2 \alpha / 4m, \quad \bar{U} = 2F_0 / \sqrt{\pi \alpha},$$

$$E_{0, \text{вар}} = \left(\frac{81}{4\pi}\right)^{1/3} \left(\frac{\hbar^2 F_0^2}{m}\right)^{1/3} \approx 1,861 \left(\frac{\hbar^2 F_0^2}{m}\right)^{1/3}. \quad (2)$$

Так как вариационный расчет дает ограничение сверху на значение энергии основного уровня, то заранее можно утверждать, что из полученных результатов (1), (2) более точным является второй; точное значение $E_0 = 1,856 \left(\hbar^2 F_0^2 / m\right)^{1/3}$. Отметим, что в обоих случаях имеет место соотношение $2\bar{T}(\alpha_0) = \bar{U}(\alpha_0)$ в согласии с теоремой вирнала, см. 6.12.

8.22. Поступая как и в предыдущей задаче, приходим к следующим результатам.

$$а) A^2 = \frac{1}{2} (2\nu - 1) a^{2\nu-1}, \quad \bar{T} = \frac{\hbar^2 \nu^2 (2\nu - 1)}{2m (2\nu + 1) a^2},$$

$$\bar{U} = -\frac{(2\nu - 1) \alpha}{2a}.$$

⁴⁾ Сравнение результатов вариационного расчета с точными в рассмотренных в этом параграфе задачах позволяет составить представление о точности таких расчетов с использованием простейших пробных функций.

Минимизируя $\bar{E}(a, \nu)$ сначала по параметру a , получаем

$$\bar{E}(a_0, \nu) = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \left(1 - \frac{1}{4\nu^2}\right), \quad a_0 = \frac{2\hbar^2\nu^2}{(2\nu+1)m\alpha}. \quad (1)$$

Теперь минимизация по ν (очевидно $\nu_0 = \infty$) дает $E_{0, \text{вар}} = -m\alpha^2/2\hbar^2$, что воспроизводит точный результат, см. 2.7. Причину такого совпадения легко понять, имея в виду соотношение $\lim (1 - z/\nu)^\nu = e^{-z}$ при $\nu \rightarrow \infty$: пробная функция для значений $a_0(\nu)$ из (1) при $\nu \rightarrow \infty$ совпадает с точной волновой функцией основного состояния.

Как видно из (1), значения $\bar{E}(a_0, \nu)$ близки к E_0 и при ν , отличных от $\nu_0 = \infty$:

ν	1	2	3	5	7	10
\bar{E}/E_0	0,750	0,938	0,972	0,990	0,995	0,998

(существенное различие проявляется лишь для малых значений ν , при которых начинает сказываться медленное убывание на больших расстояниях, по сравнению с точной, пробной волновой функцией).

б) Используя значение интеграла (Д1.5), находим

$$A^2 = \frac{2^{\nu-1}(\nu-1)! a^{2\nu-1}}{\pi(2\nu-3)!!}, \quad \bar{T} = \frac{\nu(2\nu-1)\hbar^2}{8(\nu+1)ma^2},$$

$$\bar{U} = \frac{\overline{kx^2}}{2} = \frac{ka^2}{2(2\nu-3)}.$$

Минимизация по параметру a дает ($\omega = \sqrt{k/m}$)

$$\bar{E}(a_0, \nu) = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{3}{2\nu^2 - \nu - 3}} \hbar\omega, \quad (2)$$

$$a_0 = \left(\frac{\hbar^2\nu(2\nu-1)(2\nu-3)}{4km(\nu+1)} \right)^{1/4},$$

а последующая минимизация по ν воспроизводит (при $\nu = \nu_0 = \infty$) точное значение $E_0 = \hbar\omega/2$ (объяснение этого обстоятельства—такое же, как и в случае δ -ямы, а сделанное выше замечание о близости $\bar{E}(a_0, \nu)$ к E_0 и при $\nu \neq \nu_0$ остается справедливым и для осциллятора).

в) Для кулоновского потенциала, $U = -\alpha/r$, находим

$$4\pi A^2 = (\nu-1)(2\nu-3)(2\nu-1)a^{2\nu-3},$$

$$\bar{T} = \frac{\nu(\nu-1)(2\nu-3)\hbar^2}{2(2\nu+1)ma^2}, \quad \bar{U} = -\frac{(2\nu-3)\alpha}{2a}.$$

$$\bar{E}(a_0, \nu) = - \left(1 - \frac{3}{8\nu(\nu-1)} \right) \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}, \quad a_0 = \frac{2\nu(\nu+1)\hbar^2}{(2\nu+1)m\alpha}, \quad (3)$$

а последующая минимизация по ν приводит к точному результату $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$. Ситуация здесь такая же, как и в случае рассмотренных выше потенциалов.

В заключение отметим следующее обстоятельство. Как известно, если используемая пробная функция обеспечивает достаточно высокую точность вариационного расчета E_0 , так что

$$|E_{0, \text{вар}}/E_0 - 1| \equiv \gamma^2 \ll 1,$$

то вычисление с ее помощью каких-либо других характеристик f основного состояния (таких, как плотность вероятности $|\Psi|^2$, $(\Delta x)^2$ и т. д.) имеет существенно меньшую точность и, вообще говоря, $|f_{\text{вар}}/f_{\text{точ}} - 1| \sim \gamma$. Так, в случае δ -ямы рассматриваемая пробная функция при $\nu = 10$ дает значение E_0 с погрешностью 0,2 %. Вычисленное же с ее помощью среднее

$$\overline{x^2} = \frac{8\nu^4}{(2\nu-3)(2\nu-2)(2\nu+1)^2} \left(\frac{\hbar^2}{m\alpha} \right)^2$$

отличается от точного значения на 19 %. Далее, в случае кулоновского потенциала, также при $\nu = 10$, согласно (3) $E_{0, \text{вар}}$ отличается от точного значения на 0,4 %. В то же время отличие

$$|\Psi(0)|^2 = \frac{(2\nu-3)(2\nu-1)(2\nu+1)^3}{32\pi\nu^3(\nu-1)^2} \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^3$$

от точного значения составляет 15 %. Такая существенная потеря точности при вычислении пространственных характеристик частицы связана, по-видимому, с тем, что используемые пробные функции при конечных значениях вариационного параметра ν убывают на больших расстояниях лишь степенным образом, в отличие от экспоненциального убывания точных в.ф. рассматриваемых систем.

8.23. При определении вида полиномов, аппроксимирующих в.ф. рассматриваемых состояний частицы и представляющих простейшие пробные функции вариационного метода, прежде всего следует учесть граничные условия $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$ и отсутствие нулей у в.ф. основного состояния (не считая граничных). Далее, пробная функция для первого возбужденного уровня должна быть ортогональна в.ф. основного состояния (именно при выполнении этого условия значение \bar{E} представляет ограничение сверху для энергии возбужденного уровня, сравнить с 8.28). В задачах с одномерным симметричным потенциалом такое условие ортогональности легко обеспечить благодаря раз-

личной четности в. ф. основного и первого возбужденного состояний при отражении координат относительно центра симметрии.

а) Для основного состояния выбираем $\Psi = Ax(a-x)$ при $0 \leq x \leq a$; эта пробная функция, как и точная в. ф., является четной при отражении координаты относительно центра ямы $x = a/2$. Пронормировав в. ф., находим (так как $\bar{U} = 0$, то $\bar{E} = \bar{T}$):

$$A^2 = \frac{30}{a^5}, \quad \bar{E} = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\Psi'(x)|^2 dx = \frac{5\hbar^2}{ma^2} \approx 1,013E_0. \quad (1)$$

б) Теперь, для первого возбужденного уровня, выбираем $\Psi = Bx(a/2-x)(a-x)$; множитель $(a/2-x)$ обеспечивает требуемую симметрию в. ф. Находим

$$B^2 = \frac{840}{a^7}, \quad \bar{E} = \bar{T} = 21 \frac{\hbar^2}{ma^2} \approx 1,064E_1 \quad (2)$$

(при вычислениях удобно сделать подстановку $x' = x - a/2$).

Найденные значения (1) и (2) величины \bar{E} по смыслу расчета представляют приближенные значения энергетических уровней E_0 и E_1 . Близость их к точным значениям $E_n = \pi^2 \hbar^2 (n+1)^2 / 2ma^2$ связана с тем, что рассматриваемые пробные функции отражают основные свойства точных в. ф. $\Psi_0(x)$ и $\Psi_1(x)$, сравнить с 8.21.

8.24. Ввиду взаимной непроницаемости точек в. ф. системы удовлетворяет условию $\Psi(x_1, x_2) = 0$ при $x_1 = x_2$. Соответственно, учитывая граничные условия на стенках ямы и считая для определенности, что 1-я частица находится левее 2-й, аппроксимируем точную в. ф. основного состояния выражением

$$\Psi = Ax_1(x_1 - x_2)(a - x_2), \quad 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq a,$$

играющим роль пробной функции при вариационном расчете энергии основного уровня E_0 . Пронормировав в. ф., что дает $A^2 = 5040a^{-8}$, с учетом $\bar{U} = 0$ находим

$$E_{0, \text{вар}} = \bar{T}_1 + \bar{T}_2 =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a \int_0^{x_2} \Psi^* \left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right] \Psi dx_1 dx_2 = 28 \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

($\bar{T}_1 = \bar{T}_2$). Это значение отличается на 13% от точного $E_0 = 5\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$, см. 2.51 и сделанное там замечание о вырождении уровня.

8.25. Для частицы в центральном потенциале при вариационном расчете энергии нижнего уровня с произвольным

значением орбитального момента l не возникает осложнений, связанных с необходимостью выбора пробной функции ортогональной в. ф. более низких уровней (с меньшими значениями момента): угловая зависимость в. ф. в виде $\propto Y_{lm}(\mathbf{n})$ обеспечивает такую ортогональность автоматически. Пронормировав указанную в условии пробную функцию, что дает

$$A^2 = 5(5 + \nu)(5 + 2\nu)/2\nu^2 a^{2\nu+5},$$

с учетом значения $\bar{U} = 0$ находим

$$\begin{aligned} \bar{E}(\nu) = \bar{T} &= \frac{\hbar^2}{2m} \int R^*(r) \left[\left(-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{2}{r^2} \right) R(r) \right] r^2 dr = \\ &= \frac{5(5 + \nu)(5 + 2\nu)}{4(3 + 2\nu)} \frac{\hbar^2}{ma^2}. \end{aligned}$$

Минимум $\bar{E}(\nu)$ определяет оптимальное приближенное значение (дающее ограничение сверху) энергии нижнего уровня, $n_r = 0$, с моментом $l = 1$. При этом $E_{01 \text{ вар}} \approx 10,30\hbar^2/ma^2$, точка минимума $\nu_0 \approx 0,37$. Однако и при других значениях $\nu \sim 1$ получается близкий результат, как это видно из таблицы

ν	0	0,4	1	2
$\bar{E}/\hbar^2 (ma^2)^{-1}$	10,42	10,30	10,50	11,25

Отметим, что точное значение $E_{01} = 10,10\hbar^2/ma^2$ следует из 4.9, если воспользоваться значением $x_0 = 4,4934$ первого нуля функции Бесселя $J_{3/2}(x)$.

8.26. В соответствии с основной идеей вариационного метода найдем среднее значение $\bar{E}(\gamma, \epsilon)$, минимизация которого позволит определить сдвиг уровня. Сначала нормируем пробную функцию, для чего следует выбрать

$$C^2 = \left(1 + \frac{\kappa_0 \epsilon^2 F^2}{2(\kappa_0 + \gamma)^3} \right)^{-1}, \quad \text{т. е. } C^2 \approx 1 - \frac{\epsilon^2 F^2}{2(1 + \gamma)^3}; \quad (1)$$

здесь и ниже используется «слабость» внешнего поля, а также система единиц, в которой $\hbar = m = \alpha = 1$, при этом $\kappa_0 = 1$ и $E_0^{(0)} = -1/2$ — энергия уровня в отсутствие поля. Вычислив

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \frac{1}{2} \int |\Psi'(x)|^2 dx = \frac{1}{2} C^2 \left(1 + \frac{\epsilon^2 F^2}{2(1 + \gamma)} \right), \\ \bar{U} &= -\frac{\alpha \delta(x) - Fx}{(2 + \gamma)^3} = -C^2 \left(1 + \frac{8\epsilon F^2}{(2 + \gamma)^3} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

и воспользовавшись (1), получаем (ограничиваясь членами не выше второго порядка по F)

$$\bar{E}(\epsilon, \gamma) = -\frac{1}{2} - \frac{8\epsilon F^2}{(2+\gamma)^3} + \frac{(1+(1+\gamma)^2)\epsilon^2 F^2}{4(1+\gamma)^3}. \quad (3)$$

Минимизация этого выражения по параметру ϵ дает

$$\begin{aligned} \bar{E}(\epsilon_0, \gamma) &= -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \beta_0(\gamma) F^2, \\ \beta_0(\gamma) &= \frac{128(1+\gamma)^3}{(2+\gamma)^6 [1+(1+\gamma)^2]}. \end{aligned} \quad (4)$$

Наконец, минимизация по параметру γ позволяет найти сдвиг уровня. Минимум реализуется при значении $\gamma = \gamma_0 \approx -0,34$, при этом получаем $\beta_{0, \text{вар}} = 1,225$, в то время как точное значение $\beta_0 = 5/4 = 1,250$.

8.27. Найдем среднее значение энергии частицы⁵⁾ ($C^2 = = \kappa^3/\pi$ из условия нормировки пробной функции):

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}, \quad \bar{U} = 4\kappa^3 \int_0^{\infty} r^2 U(r) e^{-2\kappa r} dr, \quad \bar{E}(\kappa) = \bar{T} + \bar{U}.$$

Так как $E_0 \leq \bar{E}(\kappa)$ (E_0 — основной уровень частицы), то если при каком-либо значении параметра $\kappa \geq 0$ будет $\bar{E}(\kappa) \leq 0$, то в рассматриваемом потенциале заведомо имеется хотя бы одно состояние д. с. (потенциал *связывает* частицу). Поэтому искомое условие принимает вид

$$\max \left\{ \kappa \int_0^{\infty} |U(r)| r^2 e^{-2\kappa r} dr \right\} \geq \frac{\hbar^2}{8m} \quad (1)$$

(использование здесь максимального значения соответствует оптимальному выбору параметра κ).

Для потенциала $U = -\alpha \delta(r-a)$ условие (1) принимает вид

$$\max \{ \alpha \kappa a^2 e^{-2\kappa a} \} \geq \frac{\hbar^2}{8m}, \quad \text{или} \quad \xi = \frac{m \alpha a}{\hbar^2} \geq \frac{e}{4} \approx 0,68,$$

в то время как точное и совпадающее с ним необходимое условие $\xi \geq 1/2$.

⁵⁾ Так как для решения задачи важен лишь знак $\bar{E}(\kappa)$, то нормировать пробную функцию необязательно.

Для потенциала из 4.8б) согласно (1) получаем

$$\xi = \frac{ma^2U_0}{\hbar^2} \geq \frac{27}{32} \approx 0,84,$$

точное условие $\xi \geq 0,72$, а необходимое $\xi \geq 1/2$.

Отметим, что довольно существенное отличие результатов вариационного расчета ξ от точных значений связано с крайне простым выбором пробной волновой функции.

8.28. Рассмотрим следующую сумму:

$$\sum_{a=0}^{N-1} \langle \Psi_a | \hat{H} | \Psi_a \rangle = \sum_{a=0}^{N-1} \bar{E}_a.$$

Выполнив здесь разложение волновых функций $\Psi_a = \sum_n C_{an} \Psi_n^{(0)}$ по с. ф. гамильтониана \hat{H} , приходим к соотношению

$$\sum_{a=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{\infty} |C_{an}|^2 E_n^{(0)} = \sum_{a=0}^{N-1} \bar{E}_a. \quad (1)$$

Важным свойством коэффициентов разложения C_{an} , кроме очевидного $\sum_n |C_{an}|^2 = 1$, является то, что для них

$$\sum_{a=0}^{N-1} |C_{an}|^2 \leq 1.$$

С учетом этого неравенства из соотношения (1) непосредственно следует утверждение задачи.

Отмеченное свойство коэффициентов C_{an} является следствием взаимной ортогональности волновых функций Ψ_a . Действительно, из условия $\langle \Psi_b | \Psi_a \rangle = \delta_{ab}$ имеем

$$\sum_n C_{an} C_{bn}^* = \delta_{ab}.$$

Умножив это соотношение на $C_{an'}^* C_{bn'}$ и выполнив суммирование по a и b , находим

$$\begin{aligned} \sum_{a=0}^{N-1} |C_{an'}|^2 &= \sum_{n=0}^{\infty} \left| \sum_{a=0}^{N-1} C_{an} C_{an'}^* \right|^2 = \\ &= \left(\sum_{a=0}^{N-1} |C_{an'}|^2 \right)^2 + \sum'_{n=0} \left| \sum_{a=0}^{N-1} C_{an} C_{an'}^* \right|^2, \end{aligned}$$

где штрих у суммы означает отсутствие в ней слагаемого с $n = n'$. Отсюда, очевидно, и следует обсуждаемое неравенство.

В заключение отметим, что результат задачи является обобщением соотношения $\bar{E} \geq E_0$, лежащего в основе вариационного

метода расчета энергии основного состояния, на случай возбужденных состояний. Существенно, что в нем фигурируют пробные функции, обладающие лишь взаимной ортогональностью (при этом не требуется их ортогональность точным собственным функциям гамильтониана, отвечающим более низким уровням энергии).

8.29. Из уравнения Шрёдингера, записанного в интегральной форме

$$\Psi_p^+(x) = e^{ipx/\hbar} - \frac{im}{\hbar|p|} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i|p||x-x'|/\hbar} U(x') \Psi_p^+(x') dx', \quad (1)$$

следует выражение для амплитуды отраженной волны

$$A(p) = -\frac{im}{\hbar|p|} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} U(x) \Psi_p^+(x) dx, \quad (2)$$

определяющей коэффициент отражения частиц $R = |A|^2$, см. 2.42.

Решение уравнения (1) в виде ряда по степеням потенциала (кратности взаимодействия)

$$\Psi_p^+ = \Psi_p^{(0)} + \Psi_p^{(1)} + \dots$$

дает, очевидно,

$$\Psi_p^{(0)} = e^{ipx/\hbar},$$

$$\Psi_p^{(1)} = -\frac{im}{\hbar|p|} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(|p||x-x'| + px')\right] U(x') dx'. \quad (3)$$

Соответственно имеем аналогичное разложение и для амплитуды $A(p) = A^{(1)} + A^{(2)} + \dots$, где

$$A^{(1)} = -\frac{im}{\hbar|p|} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ipx/\hbar} U(x) dx, \quad (4)$$

$$A^{(2)} = -\frac{m^2}{\hbar^2 p^2} \iint_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px' + px + |p||x-x'|)\right] \times \\ \times U(x') U(x) dx dx'.$$

Вводя фурье-компоненту потенциала

$$\tilde{U}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} U(x) dx$$

и используя соотношение (Д1.3), формулы (4) удобно записать в виде

$$A^{(1)} = -\frac{im}{\hbar |p|} \tilde{U}(2p), \quad (5)$$

$$A^{(2)} = \frac{im^2}{\pi \hbar^2 |p|} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{U}(p-q) \tilde{U}(p+q) dq}{q^2 - p^2 - i\epsilon}$$

($\epsilon > 0$ — бесконечно малая величина). На основе этих выражений, отражающих структуру ряда теории возмущений для $A(p)$, можно сделать следующие заключения относительно ее применимости.

1) Теория возмущений заведомо неприменима при $p \rightarrow 0$, т. е. для медленных частиц. Это неудивительно: согласно 2.39 имеем $R \rightarrow 1$ при $p \rightarrow 0$, а применимость теории возмущений предполагает $R \ll 1$.

2) Обозначив через U_0 и a характерные величину и радиус потенциала, замечаем, что в случае $pa/\hbar \leq 1$ (т. е. для не слишком быстрых частиц, при этом $\tilde{U}(p) \sim U_0 a$) применимость теории возмущений предполагает выполнение условия

$$U_0 \ll \frac{\hbar |p|}{ma}, \quad \left(\frac{|p|a}{\hbar} \leq 1 \right), \quad (6)$$

при котором как $|\Psi_p^{(1)}| \ll |\Psi_p^{(0)}|$, так и $|A^{(2)}| \ll |A^{(1)}|$.

3) В случае быстрых частиц, $p \rightarrow \infty$, хотя искажение волновой функции Ψ_p^+ по сравнению с в. ф. $\Psi_p^{(0)}$ всегда мало, вопрос о применимости теории возмущений (и о сходимости ряда для $A(p)$ вообще) существенно связан с характером убывания $\tilde{U}(p)$ при $p \rightarrow \infty$.

Как видно из (5), при законе убывания $\tilde{U}(p)$, удовлетворяющем условию

$$|\tilde{U}(p)| > C \exp(-\alpha |p|^v), \quad |p| \rightarrow \infty$$

с $v < 1$ (т. е. более медленном, чем экспоненциальное $\sim e^{-\alpha |p|}$) интеграл в (5) убывает быстрее, чем $\tilde{U}(2p)$ и соответственно $|A^{(2)}|/|A^{(1)}| \rightarrow 0$ при $p \rightarrow \infty$ (аналогичное условие имеет место и для членов $A^{(n)}$ более высоких порядков). Это означает, что при $p \rightarrow \infty$ теория возмущений применима и ряд для $A(p)$ сходится при любом значении U_0 .

В случае закона убывания

$$|\tilde{U}(p)| < B \exp(-\alpha |p|^v), \quad v > 1, \quad p \rightarrow \infty,$$

т. е. более быстрого, чем экспоненциальное $e^{-\alpha|p|}$, наоборот, интеграл в (5) убывает более медленно, чем $\tilde{U}(2p)$ (см. ниже случай ε), так что $|A^{(2)}|/|A^{(1)}| \rightarrow \infty$ и ряд теории возмущений расходится.

Отметим, что переходным между рассмотренными случаями является режим убывания $\tilde{U}(p) \propto |p|^\gamma e^{-\alpha|p|}$ с $\gamma = 1$: при $\gamma > 1$ теория возмущений применима, а при $\gamma < 1$, наоборот, уже неприменима. В случае же $\gamma = 1$ интеграл в (5) убывает так же, как и $\tilde{U}(2p)$. При этом вопрос о применимости теории возмущений и сходимости ряда для $A(p)$ зависит от числового значения параметра $m\alpha^2 U_0 / \hbar^2$.

Рассмотрим приложения теории возмущений к конкретным потенциалам, указанным в условии задачи.

а) Для δ -потенциала согласно (4) находим

$$A^{(1)} = -\frac{i m \alpha}{\hbar |p|}, \quad A^{(2)} = -\frac{m^2 \alpha^2}{\hbar^2 p^2}, \quad (7)$$

что полезно сравнить с разложением точного выражения для амплитуды, см. 2.30:

$$A = -\frac{i m \alpha}{\hbar |p| + i m \alpha} = -\frac{i m \alpha}{\hbar |p|} - \frac{m^2 \alpha^2}{\hbar^2 p^2} + \dots$$

В согласии с (6) теория возмущений применима при $m\alpha \ll \hbar p$ (для δ -потенциала $a = 0$, а $U_0 a \sim \alpha$); ряд теории возмущений для $A(p)$ является сходящимся при выполнении условия $m\alpha / \hbar p < 1$.

Для расчета амплитуды $A(p)$ в остальных случаях будем считать $p > 0$ и, учитывая симметричность подинтегральной функции в формуле (4), перепишем ее в виде

$$A^{(2)} = -\frac{2m^2}{\hbar^2 p^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ipx/\hbar} U(x) \int_{-\infty}^x U(x') dx' dx. \quad (8)$$

б) Для указанного в условии потенциала элементарное интегрирование в выражениях (4) и (8) дает

$$A^{(1)} = -\frac{i m \alpha U_0}{\hbar p (1 - 2ipa/\hbar)}, \quad (9)$$

$$A^{(2)} = -\frac{m^2 \alpha^2 U_0^2}{\hbar^2 p^2 (1 - ipa/\hbar) (1 - 2ipa/\hbar)}.$$

Как видно, при $pa/\hbar \sim 1$ условие применимости теории возмущений, $|A^{(2)}|/|A^{(1)}| \ll 1$, совпадает с (6). Ввиду степенного убывания $\tilde{U}(p)$ теория возмущений применима и при $p \rightarrow \infty$, при этом параметром разложения является mU_0/p^2 . Для рассматри-

ваемого потенциала точное значение амплитуды

$$A(p) = J_{1-2ika}(2i\xi) / J_{-1-2ika}(2i\xi), \quad (10)$$

где $k = p/\hbar$, $\xi = (2ma^2U_0/\hbar^2)^{1/2}$, $J_\nu(z)$ — функция Бесселя.

в) Для потенциала $U = U_0 \operatorname{ch}^{-2}(x/a)$ в первом порядке теории возмущений

$$A^{(1)} = -\frac{imU_0}{\hbar p} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ipx/\hbar} \operatorname{ch}^{-2}\left(\frac{x}{a}\right) dx. \quad (11)$$

Интеграл вычисляется с помощью вычетов замыканием контура интегрирования в верхнюю полуплоскость комплексной переменной x . Особыми точками подынтегральной функции — полюсами второго порядка — являются $x_n = ia(n\pi + \pi/2)$, где $n = 0, 1, \dots$, $a > 0$. Так как при $x \rightarrow x_n$ имеем

$$\operatorname{ch}^2(x/a) \approx -(x - x_n)^2/a^2 + O((x - x_n)^4)$$

и соответственно при этом

$$\frac{e^{2ipx/\hbar}}{\operatorname{ch}^2(x/a)} \approx -e^{2ipx_n/\hbar} \left[\frac{a^2}{(x - x_n)^2} + \frac{2ipa^2}{\hbar} \frac{1}{(x - x_n)} \right],$$

то суммарный вклад всех полюсов оказывается равным

$$A^{(1)} = -\frac{imU_0}{\hbar p} 2\pi i \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{2ipa^2}{\hbar} e^{2ipx_n/\hbar} \right) = -\frac{2\pi ima^2 U_0}{\hbar^2 \operatorname{sh}(\pi pa/\hbar)} \quad (12)$$

(члены ряда представляют геометрическую прогрессию).

Далее, интеграл в выражении для $A^{(2)}$ согласно (8)

$$A^{(2)} = -\frac{2maU_0}{\hbar^2 p^2} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{ch}^{-3}\left(\frac{x}{a}\right) \exp\left[\frac{2ipx}{\hbar} + \frac{x}{a}\right] dx \quad (13)$$

в результате простых преобразований может быть выражен через интеграл (11), что позволяет получить

$$A^{(2)} = -4\pi \left(1 + \frac{ipa}{\hbar}\right) \frac{m^2 a^3 U_0^2}{\hbar^3 p \operatorname{sh}(\pi pa/\hbar)}. \quad (14)$$

Сравнение (12) и (14) показывает, что при $pa/\hbar \sim 1$ применимость теории возмущений, как и следует, предполагает выполнение условия (6). Что же касается случая $pa/\hbar \gg 1$, то теория возмущений применима лишь при условии $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$. Такая ситуация отличается от имевшей место для двух предыдущих потенциалов и связана с экспоненциальным убыванием

$\tilde{U}(p) \propto p e^{-\pi p a / \hbar}$ при $p \rightarrow \infty$. Отметим, что данный потенциал допускает точное вычисление $A(p)$, см. [1, § 25]; на основании этого результата легко прийти к заключению, что при $|U_0| > > \hbar^2/8ma^2$ ряд теории возмущений является расходящимся даже при $p \rightarrow \infty$.

г) Для потенциала $U = U_0 e^{-x^2/a^2}$ получаем

$$A^{(1)} = -i \sqrt{\pi} \frac{maU_0}{\hbar p} \exp\left(-\frac{p^2 a^2}{\hbar^2}\right). \quad (15)$$

Для вычисления согласно (5) амплитуды второго приближения в случае быстрых частиц, $p \gg \hbar/a$, замечаем, что в интеграле по q доминирующую роль играет область $q \leq \hbar/a$ (вклад от остальной области несуществен из-за экспоненциального убывания подинтегральной функции), так что в знаменателе можно положить $q = 0$. После этого интеграл легко вычисляется, что позволяет получить

$$A^{(2)} \approx -i \sqrt{2\pi} \frac{m^2 a U_0^2}{\hbar p^3} \exp\left(-\frac{p^2 a^2}{2\hbar^2}\right), \quad p \gg \frac{\hbar}{a}. \quad (16)$$

Сравнение с (15) показывает, что $|A^{(2)}|/|A^{(1)}| \rightarrow \infty$ при $p \rightarrow \infty$ и теория возмущений неприменима (для быстрых частиц; ряд для $A(p)$ при этом является расходящимся).

В заключение подчеркнем, что отмеченная в этой задаче различная роль высших порядков теории возмущений по взаимодействию при $p \rightarrow \infty$ в зависимости от закона убывания $\tilde{U}(p)$ отражает общую физическую ситуацию: при «медленном» убывании $\tilde{U}(p)$ (грубо говоря, в случае $|\tilde{U}| > C e^{-\alpha p}$) большое изменение импульса частицы происходит в результате однократного взаимодействия, а при «быстром» убывании — в результате большого числа актов взаимодействия, каждый из которых сопровождается уже сравнительно небольшим изменением импульса, сравнить с результатами 4.18 и 13.84.

8.30. Фурье-компоненту потенциала, определяющую амплитуду отраженной волны $A^{(1)}$ согласно формуле (4) из предыдущей задачи, преобразуем к виду

$$\tilde{U}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ikx} dx = \frac{i}{k} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{\partial U(x)}{\partial x} dx \quad (1)$$

(для этого следует записать $ike^{ikx} = \partial e^{ikx}/\partial x$ и выполнить интегрирование по частям). Для разрывного в точке $x = 0$ потенциала производная $U'(x)$ содержит слагаемое $(U_2 - U_1)\delta(x)$ с δ -функцией, которое и определяет асимптотику

$$\tilde{U} \approx i(U_2 - U_1)/k \quad \text{при } k \rightarrow \infty$$

(при этом вклад остальной области интегрирования несуществен из-за быстрой осцилляции подынтегральной функции). Соответственно

$$R(p) \approx \frac{m^2(U_2 - U_1)^2}{4p^4} \quad (\text{при } p \rightarrow \infty), \quad (2)$$

а обобщение этой формулы на случай потенциала с разрывами в нескольких точках x_n имеет вид

$$R(p) = \frac{m^2}{4p^4} \left| \sum_n \Delta U_n e^{2ipx_n/\hbar} \right|^2, \quad p \rightarrow \infty, \quad (3)$$

где ΔU_n — скачок потенциала в соответствующей точке x_n ; подчеркнем, что для разрывных потенциалов $R \propto p^{-4}$ при $p \rightarrow \infty$.

Согласно (2), (3) находим коэффициенты отражения

$$1) \quad R \approx \frac{m^2 U_0^2}{4p^4}, \quad 2) \quad R \approx \frac{m^2 U_0^2}{p^4} \sin^2\left(\frac{pa}{\hbar}\right)$$

для потенциала из 8.29б) и для прямоугольного потенциала соответственно, которые совпадают, естественно, с асимптотиками точных выражений для $R(p)$ при $p \rightarrow \infty$. В связи с данной задачей см. также 8.31.

8.31. Аналогично формуле (1) предыдущей задачи получаем

$$\tilde{U}(k) = -k^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} U''(x) dx. \quad (1)$$

В случае потенциала, имеющего излом, производная $U'(x)$ разрывна, а $U''(x)$ содержит δ -функциональное слагаемое вида $-\Delta F \delta(x)$, где $-\Delta F = U'(0+) - U'(0-)$ — скачок производной потенциала в точке излома, которое и определяет асимптотику $A^{(1)}$. Коэффициент отражения для потенциала, имеющего изломы в нескольких точках x_n , при $p \rightarrow \infty$ равен

$$R(p) \approx \frac{m^2 \hbar^2}{16p^6} \left| \sum_n \Delta F_n e^{2ipx_n/\hbar} \right|^2, \quad (2)$$

так что при этом $R(p) \propto p^{-6}$. В приложении к параболическому барьеру формула (2) дает

$$R \approx \frac{m^2 \hbar^2 U_0^2}{a^2 p^6} \sin^2\left(\frac{2pa}{\hbar}\right).$$

В заключение сделаем замечание о связи асимптотики при $p \rightarrow \infty$ коэффициента отражения с аналитическими свойствами потенциальной энергии $U(x)$ как функции переменной x . Если

потенциал имеет *особые точки (сингулярности)* на вещественной оси x , то $R(\rho)$ убывает степенным образом. При этом чем слабее сингулярность, тем убывание более быстрое; сравнить результаты данной и предыдущей задач. Если же $U(x)$ не имеет особых точек на вещественной оси x (бесконечнократно дифференцируемая функция), то $R(\rho)$ убывает экспоненциально.

8.32. Ввиду известного соотношения для функций Блоха — собственных функций гамильтониана

$$\Psi_{n,q}(x+a) = e^{iqa} \Psi_{n,q}(x), \quad -\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a} \quad (1)$$

достаточно рассмотреть решение у.Ш. лишь на отрезке $0 < x < a$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''_{n,q}(x) + U(x) \Psi_{n,q}(x) = E_n(q) \Psi_{n,q}(x). \quad (2)$$

При этом (1) выступает как своеобразное граничное условие, определяющее самосопряженное расширение⁶⁾ эрмитова оператора $\hat{p}^2/2m + U(x)$ на этом отрезке (для каждого значения q), см. 1.29. При фиксированном q спектр $E_n(q)$ дискретный, а непрерывная зависимость его от q приводит к зонной структуре спектра в целом.

В пренебрежении $U(x)$ решение уравнения (2) дает невозмущенные с. ф. и с. з.

$$\Psi_k^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{ikx}, \quad E_k^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Произведем, имея в виду соотношение (1), их классификацию по значениям квазиимпульса q (и номера n зоны). Замечая, что $k = 2\pi s/a + q$, где $s = 0, \pm 1, \dots$, нетрудно получить

$$E_n^{(0)}(q) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{a} + |q| \right)^2, & n = 0, 2, 4, \dots \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi(n+1)}{a} - |q| \right)^2, & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (3)$$

Этот спектр «собирается» из участков невозмущенного спектра $E_k^{(0)}$, см. штриховые линии на рис. 35, так что соседние зоны касаются друг друга (нет запрещенных значений E). Связь

⁶⁾ Фактически речь идет о наложении двух граничных условий:

$$\Psi(a) = e^{iqa} \Psi(0), \quad \Psi'(a) = e^{iqa} \Psi'(0)$$

в соответствии с тем, что индексы дефекта этого оператора суть (2,2).

импульса свободной частицы с квазиимпульсом определяется соотношениями

$$k = \begin{cases} \pi n/a + q, & q > 0, \\ -\pi n/a + q, & q < 0, \end{cases} \quad n = 0, 2, 4, \dots, \quad (4a)$$

$$k = \begin{cases} -\pi(n+1)/a + q, & q > 0, \\ \pi(n+1)/a + q, & q < 0, \end{cases} \quad n = 1, 3, 5, \dots, \quad (4b)$$

из которых следует явный вид $\Psi_{n,q}^{(0)} = e^{ikx}/\sqrt{a}$ невозмущенных с. ф. гамильтониана, удовлетворяющих условию (1).

Из выражений (3) или (4), см. также рис. 35, видно, что при фиксированном q невозмущенные уровни $E_n^{(0)}(q)$ разделены, вообще говоря, конечным интервалом. Поэтому для вычисления их сдвигов под влиянием $U(x)$ можно воспользоваться формулами (VIII.1) теории возмущений в отсутствие вырождения. В частности, поправка первого порядка

$$E_n^{(1)}(q) = \frac{1}{a} \int_0^a U(x) dx \equiv \bar{U} \quad (5)$$

(в этом приближении сдвиг одинаков для всех значений n и q !). Условием применимости (5) является

$$|E_n^{(0)}(q) - E_{n+1}^{(0)}(q)| \gg E_n^{(1)}(q).$$

Как видно из (3) и рис. 35, оно нарушается при следующих значениях q : 1) $q \approx 0$ и 2) $q \approx \pm \pi/a$, когда происходит касание соседних энергетических зон при значениях энергии, равных соответственно

$$1) E_n^{(0)}(0) = E_{n+1}^{(0)}(0) \quad \text{и} \quad 2) E_n^{(0)}(\pm \pi/a) = E_{n-1}^{(0)}(\pm \pi/a),$$

причем здесь в обоих случаях $n = 1, 3, 5, \dots$

При указанных выше значениях q для вычисления сдвигов $E_n^{(0)}(q)$ следует использовать теорию возмущений для близких уровней, сравнить с 8.6. Теперь, как и в случае строгого вырождения уровней, возмущение сильно «перепутывает» невозмущенные с. ф. с близкими энергиями, так что

$$\tilde{\Psi}(x) = C_1 \Psi_{n,q}^{(0)}(x) + C_2 \Psi_{n+1,q}^{(0)}(x); \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

Возмущенные уровни и коэффициенты $C_{1,2}$, определяющие правильные функции нулевого приближения, находятся так же, как и в теории возмущений при наличии вырождения. Секулярное уравнение принимает вид

$$\begin{vmatrix} \bar{U} + E_n^{(0)}(q) - E & U_{n, n+1} \\ U_{n+1, n} & \bar{U} + E_{n+1}^{(0)}(q) - E \end{vmatrix} = 0, \quad (7)$$

здесь учтено значение (5) для U_{nn} . В матричном элементе $U_{n+1, n}$ можно воспользоваться с. ф. $\Psi_{n(n+1), q}^{(0)}(x)$ при значении q , отвечающем непосредственно условию совпадения рассматриваемых уровней. Значения соответствующих импульсов равны $\hbar k = \pm \pi(n+1)\hbar/a$ (подчеркнем, что обсуждается случай пересечения n и $n+1$ зон), так что в (7)

$$|U_{n+1, n}| = \frac{1}{a} \left| \int_0^a \exp\left[\pm 2i\pi(n+1)\frac{x}{a}\right] U(x) dx \right| \equiv \Delta_n \quad (8)$$

(от выбора знака \pm величина Δ_n не зависит).

Решение уравнения (7) дает

$$E_{n(n+1)}(q) = \bar{U} + \frac{1}{2} \left[E_n^{(0)}(q) + E_{n+1}^{(0)}(q) \mp \sqrt{(E_{n+1}^{(0)}(q) - E_n^{(0)}(q))^2 + 4\Delta_n^2} \right] \quad (9)$$

(знак $-$) отвечает нижней зоне n , а $(+)$ — верхней зоне $n+1$). График зависимости $E_n(q)$ согласно (3), (5), (9) представлен на рис. 35 (сплошная линия, причем для определенности выбрано $\bar{U} = 0$). Учет взаимодействия приводит к появлению зонной структуры с энергетической щелью в спектре. Ширина щели — расстояние между соседними зонами n и $n+1$ — равна $2\Delta_n$. Коэффициенты $C_{1,2}$ в (6) находятся обычным образом:

$$C_1 = C_2 U_{n, n+1} / (E - \bar{U} - E_n^{(0)}(q)) \quad (10)$$

(два значения E здесь определяются соотношением (9)). В частности, непосредственно в точке квазипересечения невозмущенных уровней $C_1 = \pm C_2 = 1/\sqrt{2}$.

Отметим, что при таком удалении (с изменением q) от точки квазипересечения, при котором

$$\delta E_n^{(0)}(q) \equiv E_{n+1}^{(0)}(q) - E_n^{(0)}(q) \gg \Delta_n,$$

из (9) следует

$$E_{n(n+1)}(q) \approx E_{n(n+1)}^{(0)}(q) + \bar{U} \mp \frac{\Delta_n^2}{\delta E_n^{(0)}(q)}. \quad (11)$$

Последний член здесь является частью поправки второго порядка теории возмущений, соответствующей учету в (VIII.1) лишь одного слагаемого, отвечающего ближайшему уровню.

Воспользовавшись явным выражением для $E_n^{(0)}$, формулу (9) можно переписать в более наглядном виде. Так, в случае, когда в (9) для нижней зоны значение n нечетное (квазипересечение уровней при $q = 0$), имеем

$$E_{n(n+1)}(q) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_n^2 + q^2) + \bar{U} \mp \sqrt{\frac{\hbar^4 k_n^2 q^2}{m^2} + \Delta_n^2}, \quad (12)$$

где $k_n = \pi(n+1)/a$, $n = 1, 3, \dots$. При $|q| \ll m\Delta_n/\hbar^2 k_n$ отсюда следует⁷⁾

$$E_{n(n+1)}(q) \approx \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 + \bar{U} \mp \Delta_n \mp \frac{1}{2} \left[\frac{\hbar^2 k_n^2}{m^2 \Delta_n} \mp \frac{1}{m} \right] \hbar^2 q^2. \quad (13)$$

В случае когда для нижней зоны значение n четное и квазипересечение уровней имеет место при $q = \pm\pi/a$, получаем аналогичные (12) и (13) выражения, но уже с $n = 0, 2, \dots$, с единственной заменой в них $|q|$ на $\pi/a - |q|$.

В заключение отметим, что в применении к потенциалу из 2.53 имеем $\bar{U} = \alpha$ и $\Delta_n = |\alpha|$, так что энергетическая щель между соседними зонами принимает постоянное значение (не зависит от n ; здесь проявляется специфика δ -потенциала, для любого другого $\Delta_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$). В то же время ширина разрешенной зоны растет $\propto n$ с увеличением n .

8.33. Возмущение осциллятора имеет вид $V = -ex\mathcal{E}(t)$. Его матричные элементы $V_{kn}(t)$, а соответственно и вероятности переходов осциллятора в первом порядке теории возмущений отличны от нуля лишь для значений $k = n \pm 1$, см. (II.3) (переходы возникают только между соседними уровнями). Воспользовавшись формулой (VIII.9), получаем

$$W^{(1)}(n \rightarrow k) = \frac{e^2 |I|^2}{2m\hbar\omega} \cdot \begin{cases} (n+1), & k = n+1, \\ n, & k = n-1, \end{cases} \quad (1)$$

где

$$I(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) \mathcal{E}(t) dt$$

(заметим, что $|I(\omega)|^2$ не зависит от знака ω).

⁷⁾ Обращаем внимание на квадратичную зависимость от квазиимпульса энергии вблизи границы зоны: $E(q) - E(0) \propto q^2$.

Для рассматриваемых зависимостей $\mathcal{E}(t)$ находим ($\tau > 0$):

$$a) I(\omega) = \mathcal{E}_0 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(i\omega t - \frac{t^2}{\tau^2}\right) dt = \sqrt{\pi} \tau \mathcal{E}_0 \exp\left(-\frac{\omega^2 \tau^2}{4}\right),$$

$$б) I(\omega) = \mathcal{E}_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \frac{dt}{1 + (t/\tau)^2} = \pi \tau \mathcal{E}_0 e^{-|\omega \tau|},$$

$$в) I(\omega) = \mathcal{E}_0 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(i\omega t - \frac{t^2}{\tau^2}\right) \cos(\omega_0 t) dt = \\ = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \tau \mathcal{E}_0 \left\{ \exp\left[-\frac{1}{4}(\omega - \omega_0)^2 \tau^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{4}(\omega + \omega_0)^2 \tau^2\right] \right\}.$$

Основным условием применимости полученных по теории возмущений результатов является выполнение неравенства (VIII.3), принимающего в данной задаче вид

$$e \mathcal{E}_0 \sqrt{(n+1) \hbar / m \omega} \ll \hbar \omega.$$

Для нерезонансного возмущения это условие обеспечивает малость вероятностей переходов, $W^{(1)}(n \rightarrow k) \ll 1$. В случае же слабого резонансного воздействия (см. в)) условие малости вероятности перехода накладывает ограничение на время действия возмущения.

Отметим, что при медленном включении и выключении постоянного поля, т. е. при $\tau \rightarrow \infty$, вероятности переходов стремятся к нулю⁸⁾ (однако в случае в) при $\omega \rightarrow \omega_0$ они с ростом τ , наоборот, возрастают, что связано с резонансным характером действия поля).

8.34. Возмущение ротатора имеет вид $V = -d\mathcal{E}(t) \cos \varphi$ (φ — угол между осью ротатора и направлением электрического поля). Матричные элементы возмущения отличны от нуля лишь при $m' = m \pm 1$ и равны при этом

$$V_{m'm} = -d\mathcal{E}(t)/2,$$

см. 8.8. Соответственно в первом порядке теории возмущений возникают переходы лишь на соседние по энергии уровни, их вероятности

$$W^{(1)}(m \rightarrow m') = \frac{d^2}{4\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{i\omega m' m t} dt \right|^2, \quad m' = m \pm 1. \quad (1)$$

⁸⁾ Это утверждение при *адиабатических* воздействиях на систему сохраняется и в случае достаточно сильных полей, см. 8.54, 8.55.

Значения интеграла в (1) приведены в предыдущей задаче; следует только учесть, что теперь значения частот перехода $\omega_{m'm}$ равны $(1 \pm 2m)\hbar/2I$ для $m' = m \pm 1$. В связи с условиями применимости полученного результата см. 8.33.

8.35. Возмущенные ротатора $V = -d\mathcal{E}(t)\cos\theta$. Используя значения матричных элементов V_{kn} из 8.11 (где рассматривался случай стационарного поля), по формуле (VIII.9) получаем

$$W^{(1)}(l, m \rightarrow l'm) = \\ = \frac{d^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{i\omega_{l'l}t} dt \right|^2 \times \begin{cases} |a_{lm}|^2, & l' = l + 1, \\ |a_{l-1, m}|^2, & l' = l - 1. \end{cases}$$

В первом порядке теории возмущений возникают переходы лишь на соседние по энергии уровни, при этом из-за сохранения l_z значение m не изменяется. Частоты переходов равны:

$$\omega_{l+1, l} = \hbar(l+1)/I \quad \text{и} \quad \omega_{l-1, l} = -\hbar l/I.$$

Значения интеграла в (1) приведены в 8.33.

8.36. Рассматривая взаимодействие ротатора с полем как возмущение

$$V = -d\mathcal{E}(t) = -d\mathcal{E}(t)\cos(\varphi - \omega_0 t),$$

нетрудно заметить, что результаты для вероятностей переходов ротатора во вращающемся поле получаются непосредственно из формулы (1) задачи 8.34 заменой фигурирующего в ней интеграла на

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) \exp[i(\omega_{m'm} + m\omega_0 - m'\omega_0)t] dt.$$

Существенно, однако, что теперь вероятность перехода определяется фурье-компонентой поля \mathcal{E} с частотой

$$\tilde{\omega}_{m'm} = \omega_{m'm} + (m - m')\omega_0,$$

которая при соответствующем значении ω_0 может быть малой. При этом вероятность такого перехода при большой длительности действия поля может резко возрасти. Возникновение резонансной ситуации легко понять, если перейти во вращающуюся совместно с полем систему координат, см. 6.29. В этой системе уровни энергии невозмущенного ротатора, $E_{\text{вр}, m} = E_m^{(0)} - \hbar\omega_0 m$, с различными значениями проекции момента m могут оказаться вырожденными, и медленно изменяющееся во времени возмущение может привести (при достаточной его длительности) к су-

щественным переходам между соответствующими состояниями, см. 8.40. В связи с этим заметим, что значение $\tilde{\omega}_{m'm}$ как раз и представляет частоту перехода для рассматриваемых состояний ротатора во вращающейся системе координат. Подчеркнем, что сделанное замечание о переходах, вызываемых возмущением, источники которого «вращаются» с постоянной угловой скоростью, носит достаточно общий характер.

8.37. Исходим из формул (VIII.6)—(VIII.9), отражающих постановку задачи и ее решение в первом порядке теории возмущений. При этом

$$a_{kn}(t) = \delta_{kn} + a_{kn}^{(1)}(t) + a_{kn}^{(2)}(t) + \dots,$$

где значения амплитуд первого приближения $a_{kn}^{(1)}(t)$ определяются формулой (VIII.8). Подставив их в уравнение (VIII.7), получаем

$$\dot{a}_{kn}^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_m V_{km}(t) a_{mn}^{(1)}(t) e^{i\omega_{km}t}.$$

Отсюда, воспользовавшись (VIII.8) и учтя, что $a_{kn}^{(2)}(-\infty) = 0$, находим

$$a_{kn}^{(2)}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{-\infty}^t V_{km}(t') e^{i\omega_{km}t'} \int_{-\infty}^{t'} V_{mn}(t'') e^{i\omega_{mn}t''} dt'' dt'. \quad (1)$$

Вероятность перехода системы из начального n -го в конечное k -е (при $t = +\infty$) состояние равна ($k \neq n$)

$$W(n \rightarrow k) = |a_{kn}(t = +\infty)|^2 = |a_{kn}^{(1)}(\infty) + a_{kn}^{(2)}(\infty) + \dots|^2.$$

Если $a_{kn}^{(1)}(\infty) = 0$, то

$$W^{(2)}(n \rightarrow k) = |a_{kn}^{(2)}(\infty)|^2, \quad k \neq n,$$

определяет вероятность соответствующего перехода, запрещенного в первом порядке теории возмущений.

8.38. Из выражения (1) предыдущей задачи с учетом значений матричных элементов возмущения $V = -e\mathcal{E}(t)x$ для осциллятора, см. (II.3), следует, что во втором порядке появляются переходы осциллятора из начального n -го состояния в конечные состояния с квантовыми числами $n \pm 2$, запрещенные в первом порядке теории возмущений, см. 8.33. При этом сумма в указанном выражении сводится лишь к одному слагаемому, соответственно с $m = n \pm 1$. Фигурирующие в этом слагаемом частоты переходов совпадают: $\omega_{km} = \omega_{mn} = \pm\omega$ (ввиду

эквидистантности уровней осциллятора), что позволяет упростить интегрирование, так как

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \int_{-\infty}^t f(t') e^{i\omega t'} dt' = \frac{1}{2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \right]^2.$$

В результате описанных преобразований получаем

$$a_{n \pm 2, n}^{(2)}(\infty) = -\frac{e^2}{4m\hbar\omega} g_n^{(\pm)} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{\pm i\omega t} dt \right]^2,$$

где

$$g_n^{(+)} = \sqrt{(n+1)(n+2)} \quad \text{и} \quad g_n^{(-)} = \sqrt{(n-1)n}.$$

Вероятности рассматриваемых переходов

$$W^{(2)}(n \rightarrow k) = |a_{n \pm 2, n}^{(2)}(\infty)|^2.$$

Сравнение их с вероятностями переходов, происходящих в первом порядке теории возмущений, см. 8.33, показывает, что $W^{(2)} \sim [W^{(1)}]^2$; соответственно $W^{(2)}/W^{(1)} \sim W^{(1)} \ll 1$ в условиях применимости теории возмущений.

8.39. Парадокса в действительности нет. Следует просто иметь в виду, что для вычисления квадрата модуля величины $a \approx 1 + a^{(1)} + a^{(2)} + \dots$, представляющей разложение в ряд по некоторому малому параметру $V \ll 1$ (так что $|a^{(n)}| \sim V^n$), с точностью до членов второго порядка малости включительно, с такой же точностью необходимо знать и вещественную часть⁹⁾ a :

$$|a|^2 = 1 + 2 \operatorname{Re} a^{(1)} + |a^{(1)}|^2 + 2 \operatorname{Re} a^{(2)} + O(V^3),$$

$$|a^{(1)}|^2 \sim \operatorname{Re} a^{(2)} \sim V^2$$

($a_{nn}^{(1)}$ согласно (VIII.8) — мнимая величина).

Обсудим теперь вопрос о сохранении нормировки волновой функции системы с учетом переходов в первом порядке теории возмущений. Согласно формуле (1) из задачи 8.37 имеем

$$a_{nn}(t \rightarrow +\infty) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{nn}(t) dt -$$

$$- \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t} \int_{-\infty}^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' dt,$$

⁹⁾ Мнимую же часть a достаточно знать лишь в первом порядке!

так что вероятность системе остаться при $t \rightarrow +\infty$ в исходном n -м состоянии с точностью до членов второго порядка по возмущению включительно

$$W_n^{(2)} = |a_{nn}(\infty)|^2 = 1 + \frac{1}{\hbar^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} V_{nn}(t) dt \right]^2 - \frac{1}{\hbar^2} \left\{ \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t} \int_{-\infty}^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' dt + \text{к. с.} \right\} \quad (1)$$

(к. с. означает слагаемое, получающееся комплексным сопряжением предшествующего слагаемого). Учитывая, что $\omega_{mn} = -\omega_{nm}$, $V_{mn}^*(t) = V_{nm}(t)$ и

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t f(t, t') dt' = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{t'}^{\infty} f(t, t') dt,$$

выражение (1) легко преобразовать к искомому виду

$$W_n^{(2)} = 1 - \frac{1}{\hbar^2} \sum'_m \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2 = 1 - \sum'_m W^{(1)}(n \rightarrow m),$$

где штрих у символа суммы означает отсутствие в ней слагаемого с $m = n$.

8.40. Хотя переходы системы в состояния, отличающиеся от исходного по энергии, малы, переходы между состояниями, относящимися к вырожденному уровню при достаточной длительности возмущения могут быть существенными. Возникающая ситуация аналогична случаю резонансного воздействия возмущения на систему, см. [1, § 40], и может рассматриваться формально как случай точного резонанса на частоте $\omega = 0$. Учитывая возможность переходов между вырожденными состояниями (не предполагая малости их вероятностей), запишем волновую функцию системы в нулевом приближении в виде, сравнить с (VIII. 6),

$$\Psi(t) = [a_1 \Psi_1^{(0)} + a_2 \Psi_2^{(0)}] e^{-i\omega_n t}$$

(для краткости записи пишем 1,2 вместо n_1, n_2). Как обычно, получаем систему уравнений

$$i\hbar \dot{a}_1 = f(t) a_2, \quad i\hbar \dot{a}_2 = f(t) a_1. \quad (1)$$

Здесь учтено, что $V_{nn} = 0$, и введено обозначение $V_{12} = f(t)$, причем функция $f(t)$ считается вещественной. Из (1) следует

$$\frac{d}{dt} (a_1 \pm a_2) = \mp \frac{i}{\hbar} f(t) (a_1 \pm a_2).$$

Отсюда с учетом начальных условий (при $t = -\infty$) находим

$$a_1(t) = \cos \xi(t), \quad a_2(t) = -i \sin \xi(t), \quad \xi(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t f(t') dt' \quad (2)$$

(эти результаты при $\xi \ll 1$ согласуются с (VIII.8)).

Теперь обобщение выражения (VIII.8) для амплитуд переходов в состояния с отличной от исходной энергией представляется очевидным и имеет вид

$$a_{kn_1}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1,2} \int_{-\infty}^t V_{kn}(t') a_n(t') e^{i\omega_{kn}t'} dt'.$$

В заключение обратим внимание на осциллирующий характер временной зависимости как амплитуд $a_{1,2}(t)$, так и вероятностей переходов, возникающий даже в случае слабого возмущения при его большой длительности. Заметим также, что согласно (1) суперпозиции $|1\rangle \pm i|2\rangle$ исходных состояний являются *диагональными* (между ними нет переходов). Появление таких независимых состояний связано с тем, что при решении задачи были использованы определенные ограничения на значения матричных элементов возмущения V_{ab} (см. комментарий в связи с системой уравнений (1)).

8.41. Запишем в. ф. КЭС в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{e_n}(q, t) &= \\ &= e^{-i(E_n^{(0)} + \epsilon_n^{(1)} + \dots)t/\hbar} \left\{ c_n(t) \Psi_n^{(0)}(q) + \sum'_k c_{nk}(t) \Psi_k^{(0)}(q) \right\} \quad (1) \end{aligned}$$

(штрих у символа суммы означает отсутствие слагаемого с $k = n$). Здесь $E_n^{(0)}$ и $\Psi_n^{(0)}$ — с.з. и с.ф. невозмущенного гамильтониана, с которыми совпадают квазиэнергия и в.ф. КЭС в нулевом приближении. Коэффициенты разложения являются периодическими функциями, в частности, $c_n(t+T) = c_n(t)$. Подставив (1) в у.Ш., умножив его слева на $\Psi_n^{(0)*}$ и проинтегрировав по координатам, получаем, ограничиваясь членами первого приближения:

$$i\hbar \dot{c}_n(t) + \epsilon_n^{(1)} c_n(t) = V_{nn}(t) c_n(t). \quad (2)$$

Отсюда

$$c_n(t) = c_0 \exp \left[i \left(\varepsilon_n^{(1)} t - \int_0^t V_{nn}(t') dt' \right) / \hbar \right]. \quad (3)$$

Значение $\varepsilon_n^{(1)}$ — поправки первого порядка в квазиэнергии, определяется из условия периодичности $c_n(t)$. Вводя $\overline{V_{nn}(t)}$ — среднее значение матричного элемента возмущения, перепишем показатель экспоненты в (3) в виде

$$\frac{i}{\hbar} \left[(\varepsilon_n^{(1)} - \overline{V_{nn}}) t - \int_0^t (V_{nn}(t') - \overline{V_{nn}}) dt' \right].$$

Так как интегральное слагаемое здесь является периодической функцией, то условие периодичности $c_n(t)$ дает

$$\varepsilon_n^{(1)} = \overline{V_{nn}(t)}. \quad (4)$$

Таким образом, значение квазиэнергии в первом порядке теории возмущений, $\varepsilon_n \approx E_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)}$, совпадает со средним за период значением энергии уровня «мгновенного» гамильтониана, $E_n(t) = E_n^{(0)} + V_{nn}(t)$, в том же приближении (сравнить с результатом 8.56 для случая адиабатического изменения гамильтониана системы).

8.42. Запишем волновую функцию КЭС в виде (сравнить с предыдущей задачей, ниже полагаем $\hbar = 1$)

$$\Psi_{\varepsilon_n}(q, t) = e^{-i(E_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)} + \dots)t} \left\{ c_n(t) \Psi_n^{(0)}(q) + \sum_k' c_{nk}(t) \Psi_k^{(0)}(q) \right\}, \quad (1)$$

при этом в рамках теории возмущений

$$c_{nk} = 1 + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots, \quad c_{nk} = c_{nk}^{(1)} + \dots$$

Подставив (1) в у. Ш. и умножив его слева¹⁰⁾ на $\langle \Psi_k^{(0)} |$ с $k \neq n$, как обычно, находим в первом приближении ($\omega_{kn} = E_k^{(0)} - E_n^{(0)}$):

$$i \dot{c}_{nk}^{(1)}(t) = \omega_{kn} c_{nk}^{(1)}(t) + V_{kn}(t).$$

¹⁰⁾ Такая символическая запись означает умножение на $\Psi_k^{(0)*}(q)$ и последующее интегрирование по координатам.

Общее решение этого уравнения имеет вид

$$c_{nk}^{(1)}(t) = e^{-i\omega_{kn}t} \left(c_{nk}^{(1)}(0) - i \int_0^t V_{kn}(t') e^{i\omega_{kn}t'} dt' \right). \quad (2)$$

Значение постоянной $c_{nk}^{(1)}(0)$ находится из условия периодичности $c_{nk}^{(1)}(t+T) = c_{nk}^{(1)}(t)$ и равно

$$c_{nk}^{(1)}(0) = -i \int_0^T V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} dt / (e^{i\omega_{kn}T} - 1) \quad (3)$$

(соотношения (2), (3) будут использованы ниже для определения поправки второго приближения для квазиэнергии).

Умножив теперь у. Ш. на $\langle \Psi_n^{(0)} |$, находим для членов первого порядка по возмущению

$$i\dot{c}_n^{(1)}(t) = -\varepsilon_n^{(1)} + V_{nn}(t).$$

Дальнейшие вычисления проведем для случая $V_{nn} \equiv 0$. При этом $c_n^{(1)} = i\varepsilon_n^{(1)}t + c_n^{(1)}(0)$ и из условия периодичности следует $\varepsilon_n^{(1)} = 0$ (сравнить с предыдущей задачей). Значение же постоянной можно выбрать $c_n^{(1)}(0) = 0$ (выбор другого значения соответствует изменению нормировки и фазы в. ф. (1) и не отражается на ее зависимости от q и t), так что $c_n^{(1)}(t) = 0$. Для членов второго порядка теории возмущений, возникающих при умножении у. Ш. на $\langle \Psi_n^{(0)} |$, получаем

$$i\dot{c}_n^{(2)}(t) = -\varepsilon_n^{(2)} + \sum_k' V_{nk}(t) c_{nk}^{(1)}(t), \quad (4)$$

где $c_{nk}^{(1)}$ определяются формулами (2) и (3). Отсюда

$$c_n^{(2)}(t) = i\varepsilon_n^{(2)}t - i \sum_k' \int_0^t V_{nk}(t') c_{nk}^{(1)}(t') dt' + c_n^{(2)}(0), \quad (5)$$

при этом постоянную $c_n^{(2)}(0)$ можно опустить, как и $c_n^{(1)}(0)$.

Значение $\varepsilon_n^{(2)}$ находится из условия периодичности коэффициента $c_n^{(2)}(t)$. Имея в виду, что как $V_{nk}(t)$ и $c_{nk}^{(1)}(t)$, так и их произведение в (5) являются периодическими функциями с

периодом T , находим искомую поправку:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n'}^{(2)} &= \frac{1}{T} \sum_k' \int_0^T V_{nk}(t) c_{nk}^{(1)}(t) dt = \\ &= -\frac{i}{T} \sum_k' \left\{ (e^{i\omega_{kn}T} - 1)^{-1} \left| \int_0^T V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} dt \right|^2 + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^T V_{nk}(t) e^{-i\omega_{kn}t} \int_0^t V_{kn}(t') e^{i\omega_{kn}t'} dt' dt \right\}. \quad (6) \end{aligned}$$

Используя эрмитовость оператора возмущения, нетрудно заметить (при $\omega_{kn} \neq 2\pi N/T$), что выражение в фигурных скобках является чисто мнимым, а $\varepsilon_n^{(2)}$ — вещественным. Если $V_{kn}(q, t) \equiv V_{kn}(q)$ (т. е. возмущение не зависит от времени) то (6) переходит в обычную формулу стационарной теории возмущений (VIII.1) для сдвига уровня во втором порядке.

В случае гармонического возмущения вида $\hat{V} = \hat{V}(q) \cos \omega t$ с $\omega = 2\pi/T$ выражение (6) существенно упрощается:

$$\varepsilon_n^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_k' |V_{nk}(q)|^2 \frac{\omega_{kn}}{\omega^2 - \omega_{kn}^2}. \quad (7)$$

Обсудим этот случай более подробно.

Прежде всего отметим, что при $\omega \rightarrow 0$ выражение (7) лишь множителем $1/2$ отличается от обычной формулы стационарной теории возмущений для $\hat{V} = \hat{V}(q)$. Это соответствует тому, что $\varepsilon_n^{(2)}$ получается как результат усреднения поправки второго приближения $E_n^{(2)}(t) \propto \cos^2 \omega t$ для «мгновенного» возмущения $V(q) \cos \omega t$, при котором $\overline{\cos^2(\omega t)} = 1/2$ (и наглядно следует из адиабатического приближения, см. 8.56). В противоположном предельном случае $\omega \rightarrow \infty$ из (7) вытекает, что $\varepsilon_n^{(2)} \propto \omega^{-2}$ (см. ниже формулу (10)).

В важном частном случае системы заряженных частиц в поле электромагнитной волны, когда $\hat{V} = -\mathcal{E}_0 \hat{d} \cos \omega t$, из (7) следует выражение для динамической поляризуемости системы (ось z направлена вдоль \mathcal{E}_0):

$$\beta_n(\omega) = 2 \sum_k' \frac{\omega_{kn} |\langle k | \hat{d}_z | n \rangle|^2}{\omega_{kn}^2 - \omega^2}, \quad \varepsilon_n^{(2)} = -\frac{1}{4} \beta_n(\omega) \mathcal{E}_0^2 \quad (8)$$

(при $\omega = 0$ динамическая поляризуемость совпадает с обычной статической поляризуемостью). В частности, для линейного осциллятора, как и в случае стационарного электрического поля в 8.2, находим

$$\beta_n(\omega) = \frac{e^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}, \quad (9)$$

где ω_0 — его собственная частота.

Воспользовавшись соотношением $p_{kn} = im\omega_{kn}\Gamma_{kn}$ и правилом сумм из 6.13, замечаем, что для системы из N заряженных частиц с одинаковыми массой m и зарядом e выражение (8) можно преобразовать к виду

$$\beta_n(\omega) = -\frac{1}{\omega^2} \left\{ \frac{e^2}{m} N - \sum_k' \frac{2\omega_{kn}^3 |\langle k | \hat{d}_z | n \rangle|^2}{\omega_{kn}^2 - \omega^2} \right\}. \quad (10)$$

Здесь первое слагаемое $\beta_0(\omega) = -\frac{e^2}{m\omega^2} N$ соответствует такому сдвигу уровня в поле волны, как если бы частицы были свободными, сравнить с 6.40, а также с (9) при $\omega_0 = 0$; оно является доминирующим при $\omega \rightarrow \infty$ (при этом поправочный член в (10) может быть сведен к диагональному матричному элементу, если учесть правило сумм из 14.11).

Формулы (7) — (10) неприменимы при $\omega \rightarrow \omega_{kn}$, где $\omega_{kn} = (E_k^{(0)} - E_n^{(0)})/\hbar$ является частотой перехода между дискретными уровнями невозмущенного гамильтониана, вызываемого возмущением V . В возникающей при этом резонансной ситуации даже слабое возмущение приводит к сильному взаимному влиянию резонирующих уровней, сравнить со следующей задачей.

Иная ситуация возникает в случае, когда резонирующее состояние $k \equiv \nu$ относится к непрерывному спектру. Теперь действие возмущения приводит к «ионизации» системы и затуханию КЭС со временем. Для определения его времени жизни согласно (7) следует сделать замену $E_n^{(0)} \rightarrow E_n^{(0)} + i\gamma$, или $\omega_{kn}^2 \rightarrow \omega_{kn}^2 - i\gamma$, где $\gamma > 0$ — бесконечно малая величина (сравнить с подстрочным примечанием на с. 646 в [1]).

Записав теперь

$$e_n^{(2)} = \Delta e_n^{(2)} - \frac{i}{2} \Gamma_n$$

и заменив суммирование по k интегрированием по ν , находим для ширины КЭС

$$\Gamma_n = -2 \operatorname{Im} e_n^{(2)} = \frac{\pi}{2} \int |V_{\nu n}|^2 \delta(E_\nu - E_n^{(0)} - \omega) d\nu \quad (11)$$

в согласии с общей формулой [1, § 42] для вероятности перехода (напомним, что $\Gamma_n = \hbar/\tau_n = \hbar\omega_n$).

В заключение заметим, что для системы в электрическом поле линейно поляризованной волны, $\hat{V} = -\mathcal{E}_0 \hat{d} \cos(\omega t)$, ширина уровня и определяемая ею мнимая часть динамической поляризуемости могут быть связаны с сечением фотоионизации¹¹⁾ этого состояния соотношением

$$\text{Im } \beta_n(\omega) = \frac{c}{4\pi\omega} \sigma_{\text{ф. и}}(\omega); \quad (12)$$

здесь c — скорость света, сравнить с 11.63 и 14.20.

8.43. Запишем волновую функцию системы в виде

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix}, \quad \psi_{1,2} = a_{1,2}(t) e^{-iE_{1,2}^{(0)}t/\hbar}$$

(сравнить с 6.41). Уравнение Шрёдингера, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Psi$ сводится к системе двух уравнений ($\hbar\omega_0 = E_2^{(0)} - E_1^{(0)}$):

$$i\hbar \dot{a}_1 = V_0 e^{-i\omega_0 t} \cos(\omega t) a_2, \quad i\hbar \dot{a}_2 = V_0 e^{i\omega_0 t} \cos(\omega t) a_1. \quad (1)$$

Во входящих сюда временных множителях

$$e^{\pm i\omega_0 t} \cos \omega t = \frac{1}{2} [e^{\pm i(\omega_0 - \omega)t} + e^{\pm i(\omega_0 + \omega)t}]$$

первое слагаемое — медленно изменяющаяся, а второе — быстро изменяющаяся функции времени. В случае слабого возмущения, $V_0 \ll \hbar\omega$, члены в уравнениях (1), содержащие быстро меняющийся множитель, могут быть опущены, так как не играют существенной роли в переходах системы, сравнить с 8.40. Учитывая это обстоятельство и сделав подстановку

$$a_{1,2}(t) = \tilde{a}_{1,2}(t) e^{\mp i\gamma t^2/2}, \quad \gamma = \omega_0 - \omega,$$

приводим систему (1) к виду ($v_0 = V_0/\hbar$):

$$2i\dot{\tilde{a}}_1 = -\gamma\tilde{a}_1 + v_0\tilde{a}_2, \quad 2i\dot{\tilde{a}}_2 = v_0\tilde{a}_1 + \gamma\tilde{a}_2. \quad (2)$$

Для двух независимых решений этой системы уравнений с постоянными коэффициентами обычным способом, с помощью

¹¹⁾ Это соотношение непосредственно следует из сопоставления рассматриваемого матричного элемента $V_{\nu n}$ с матричными элементами операторов (XIV. 12), (XIV. 13) для однофотонных переходов, определяющих сечение фотоэффекта, см. 14.18—14.20.

подстановки $\tilde{a}_{1,2}(t) = C_{1,2} e^{-i\lambda t}$, находим

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\gamma^2 + v_0^2}, \quad C_1^{(1)} = \frac{v_0}{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + v_0^2}} C_2^{(1)},$$

$$\lambda_2 = -\frac{1}{2} \sqrt{\gamma^2 + v_0^2}, \quad C_1^{(2)} = -\frac{1}{v_0} (\gamma + \sqrt{\gamma^2 + v_0^2}) C_2^{(2)}.$$

Таким образом, общее решение у. Ш. имеет вид

$$\Psi(t) = \frac{A_1}{\sqrt{1+\beta^2}} \begin{pmatrix} \beta \\ -e^{-i\omega t} \end{pmatrix} e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} + \frac{A_2}{\sqrt{1+\beta^2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ \beta \end{pmatrix} e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar}, \quad (3)$$

где

$$\varepsilon_1 = E_1^{(0)} + \frac{1}{2} \gamma + \lambda, \quad \varepsilon_2 = E_2^{(0)} - \frac{1}{2} \gamma - \lambda, \quad (4)$$

$$\lambda = \frac{1}{2} \sqrt{\gamma^2 + v_0^2}, \quad \beta = \frac{\gamma + 2\lambda}{v_0}$$

(отметим, что в точном резонансе, при $\omega = \omega_0$, имеем $\gamma = 0$ и $\beta = |v_0|/v_0 = \pm 1$).

Каждое из двух слагаемых в волновой функции (3) описывает независимое КЭС, при этом $\varepsilon_{1,2}$ являются квазиэнергиями этих состояний. Как видно, в каждом из КЭС представлены лишь по две квазиэнергетических гармоники (см. 6.40), причем они соответствуют состояниям $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, т. е. являются собственными функциями невозмущенного гамильтониана H_0 . Более высокие гармоники имеют малые амплитуды, пропорциональные степеням малого параметра $V_0/\hbar\omega_0 \ll 1$, и поэтому не появились в рассматриваемом приближении (их «исчезновение» связано с пренебрежением в системе уравнений быстро изменяющимися со временем слагаемыми).

В заключение рекомендуем читателю обсудить вопрос о переходах в системе, вызываемых возмущением, если при $t = 0$ она находилась в одном из собственных состояний невозмущенного гамильтониана.

8.44. Воспользуемся известной формулой для вероятности перехода в единицу времени из состояния дискретного спектра в состояния непрерывного спектра под влиянием постоянного возмущения

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \int |V_{vn}|^2 \delta(E_v - E_n^{(0)}) dv. \quad (1)$$

В данной задаче в роли возмущения $\hat{V} = -\begin{pmatrix} 0 & \beta \\ \beta & 0 \end{pmatrix} \delta(x)$ выступает часть взаимодействия, ответственная за связь между ка-

налами. Под в. ф. $\Psi_n^{(0)}$ исходного состояния¹²⁾ д. с. следует понимать в. ф. $\Psi_n^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_0(x) \end{pmatrix}$ связанного состояния системы в канале с возбужденной составной частицей (по поводу обозначений см. 6.39). При этом

$$\psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0 |x|}, \quad \kappa_0 = \frac{m\alpha}{\hbar^2}, \quad E_n^{(0)} = Q_0 - \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m}$$

(рассматриваемое состояние отвечает основному уровню частицы в δ -яме, см. 2.7, со смещенной на Q_0 нижней границей состояний непрерывного спектра энергии в этом канале). Наконец, в. ф. $\Psi_v^{(0)} = \begin{pmatrix} \psi_v(x) \\ 0 \end{pmatrix}$, где функция $\psi_v(x)$ описывает состояния непрерывного спектра в основном канале системы (т. е. с невозбужденной составной частицей) с энергией $E_v = E_n^{(0)}$; о конкретном выборе ψ_v см. ниже.

а) В пренебрежении взаимодействием в основном канале вместо точной в. ф. канала ψ_v можно воспользоваться в. ф. свободного движения, т. е. выбрать (приближенно) $\psi_v = (2\pi)^{-1/2} e^{ikx}$; при этом $v \equiv k$, $-\infty < k < \infty$, и $E_v = \hbar^2 k^2 / 2m$. Вычислив теперь матричный элемент возмущения

$$V_{vn} = \langle k | \hat{V} | 0 \rangle = -\beta \int \psi_k^*(x) \delta(x) \psi_0(x) dx = -\beta \sqrt{\frac{\kappa_0}{2\pi}},$$

согласно (1) получаем

$$\Gamma = \hbar\omega = \frac{\beta^2 \kappa_0}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E_n^{(0)}}}. \quad (2)$$

б) Для более точного определения Γ следует учесть взаимодействие (δ -потенциал) в конечном состоянии. При этом в качестве в. ф. ψ_v удобно выбрать в. ф. $\psi_{k,l}$, описывающие состояния с определенной четностью l , и учесть, что теперь $k = \sqrt{2mE_v/\hbar^2} > 0$. Для δ -потенциала эти в. ф. имеют вид (обращаем внимание на их нормировку):

$$\psi_{k,-1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin kx, \quad \psi_{k,+1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(k|x| + \delta),$$

¹²⁾ Истинно связанным оно является лишь в пренебрежении возмущением. Под влиянием возмущения оно становится уже квазистационарным с шириной уровня $\Gamma = \hbar\omega$. Связь с открытыми каналами играет роль конечной проницаемости барьера для квазистационарных состояний в случае систем с одним каналом, сравнить с 6.36, 6.37.

причем из условия сшивания решения при $x = 0$, см. 2.6, следует $\operatorname{tg} \delta = m\alpha/\hbar^2 k$. Матричный элемент $V_{\nu n}$, где теперь $\nu \equiv (k, l)$, отличен от нуля лишь для четных состояний с $l = +1$ и равен

$$V_{\nu n} = -\beta \sqrt{\kappa_0/\pi} \cos \delta.$$

Учтя значение δ , согласно (1) получаем

$$\Gamma = \hbar \omega = \frac{\beta^2 \kappa_0 k}{Q_0}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE_n^{(0)}}{\hbar^2}}. \quad (3)$$

Сравним полученные результаты (2) и (3). По смыслу приближения а) формула (2) применима лишь при $Q_0 \gg |E_0| = \hbar^2 \kappa_0^2 / 2m$, когда кинетическая энергия в основном канале много больше энергии связи. Действительно, в этом случае формулы (2) и (3) практически совпадают. При значениях $Q_0 \sim |E_0|$ формула (2) неприменима (для частиц с энергией $E \sim |E_0|$ коэффициент отражения $R \sim 1$, см. 2.30, и их нельзя рассматривать как свободные). Формула же (3), основанная лишь на слабости связи каналов, $\beta \ll \alpha$, остается справедливой и в этом случае (в чем легко убедиться, сравнив ее с результатом точного решения, см. формулу (4) из 6.39).

8.45. Воспользуемся общей формулой для вероятности перехода в состояния непрерывного спектра под влиянием периодического возмущения (см. [1, § 42]):

$$\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \int |F_{\nu n}|^2 \delta(E_\nu - E_n^{(0)} - \hbar\omega_0) d\nu. \quad (1)$$

В данной задаче $\hat{V} = -F_0 x \cos(\omega_0 t)$ и соответственно $\hat{F} = -F_0 x / 2$. Далее ¹³⁾, $\tilde{\Psi}_n^{(0)} = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|}$ — в. ф. основного состояния в δ -яме, $\kappa = m\alpha/\hbar^2$, $E_n^{(0)} \equiv E_0 = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$ — энергия основного состояния.

В пренебрежении действием δ -потенциала на частицу в конечном состоянии в качестве в. ф. Ψ_ν можно выбрать $\Psi_\nu = (2\pi)^{-1/2} e^{ikx}$ — в. ф. свободной частицы; при этом $\nu \equiv k$, $-\infty < k < \infty$, $E_\nu = \hbar^2 k^2 / 2m$. Вычислив теперь матричный элемент

$$F_{\nu n} = -\frac{F_0 \sqrt{\kappa}}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp[-(\kappa|x| + ikx)] dx = i \frac{\sqrt{2} k \kappa^{3/2} F_0}{\sqrt{\pi} (k^2 + \kappa^2)^2},$$

¹³⁾ Сравнить с решением предыдущей задачи.

согласно (1) находим

$$\omega = \frac{2\hbar F_0^2 |E_0|^{3/2} \sqrt{\hbar\omega_0 - |E_0|}}{m (\hbar\omega_0)^4}. \quad (2)$$

Хотя по способу вывода этой формулы (пренебрежение взаимодействием в конечном состоянии) ее справедливость предполагает выполнение условия $\hbar\omega_0 \gg |E_0|$, на самом деле она применима и при $\hbar\omega_0 \gtrsim |E_0|$ (в том числе и вблизи порога). Действительно, для учета указанного взаимодействия выберем в качестве в.ф. Ψ_v точные с. ф. невозмущенного гамильтониана (частица в δ -яме) $\Psi_{k, I}$, отвечающие определенной четности I (сравнить с предыдущей задачей). Теперь заметим, что матричный элемент F_{vn} отличен от нуля лишь для нечетных состояний, волновые функции которых не искажаются δ -потенциалом и совпадают с в.ф. свободной частицы. Соответственно формула (2) сохраняется и при учете взаимодействия в конечном состоянии, когда не возникает ограничений на энергию вылетающей частицы.

В заключение заметим, что при частотах $\hbar\omega_0 < |E_0|$ в рассматриваемом приближении вероятность ω обращается в нуль. При этом переходы частицы в состояния непрерывного спектра происходят в более высоких порядках теории возмущений («многофотонная ионизация») и имеют поэтому существенно меньшие вероятности (сравнить с туннельной ионизацией в статическом поле, см. 6.39, соответствующей предельному случаю $\omega_0 \rightarrow 0$).

8.46. Для переходов в непрерывном спектре

$$d\omega_{v_0v} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{vv_0}|^2 \delta(E_v - E_{v_0}) dv, \quad v \neq v_0, \quad (1)$$

см. [1, с. 190]. Под v_0, v следует понимать волновые «векторы» (одномерного движения) свободных частиц и соответствующие волновые функции

$$\Psi_k = \sqrt{\frac{m}{\hbar k}} e^{ikx}, \quad \Psi_{k'} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik'x}.$$

Сделаем замечание об их нормировке. Для в.ф. конечных состояний она обычная: на δ -функцию по v , причем в данном случае $v \equiv k'$. Нормировка же в.ф. начального состояния на единичную плотность потока выбирается из следующих соображений. Считая рассматриваемую систему помещенной в «ящик» большой длины L , в.ф. начального состояния следовало бы выбрать в виде $\Psi_{v_0} = e^{ikx} / \sqrt{L}$ (нормированной на единицу). При этом вероятность перехода ω имела бы свой буквальный смысл и требуемую размерность $1/T$. Однако в состояниях непрерывного

спектра обычно рассматривается не отдельная частица, а поток частиц с плотностью потока $j = \rho v = v/L$. При этом в качестве характеристики процесса используется не сама вероятность, а соответствующее «сечение» процесса, определяемое соотношением $\sigma = w/j$. Оно уже не зависит от конкретного выбора значения L (в отличие от вероятности перехода). Используемая нормировка в. ф. Ψ_k как раз и отражает описание процесса с введением соответствующего «сечения». В одномерном случае «сечение» — безразмерная величина и имеет физический смысл коэффициента отражения частиц.

Выполнив в выражении (1) интегрирование по v (т. е. по k'), получаем

$$R = w(k \rightarrow k' = -k) = \frac{m^2}{\hbar^4 k^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx \right|^2$$

(переходы происходят в состояния с $k' = -k$, отвечающие отраженным частицам). Этот результат совпадает с полученным ранее другим способом в задаче 8.29, в которой обсуждается ряд вопросов, связанных с вычислением коэффициента отражения по теории возмущений.

8.47. Так как под влиянием ограниченного воздействия \hat{V}_0 (не обязательно малого!) волновая функция системы не успевает измениться за бесконечно малый промежуток времени его включения, то непосредственно в первые моменты времени при $t > 0$ она совпадает с $\Psi_{n,i}$ — с. ф. исходного гамильтониана $\hat{H}_i \equiv \hat{H}_0$ (по условию задачи).

Изменение (в среднем) энергии системы в процессе включения взаимодействия \hat{V}_0 , очевидно, равно¹⁴⁾

$$\Delta E = \langle n, i | \hat{V}_0 | n, i \rangle. \quad (1)$$

Коэффициенты в разложении в. ф. $\Psi_{n,i}$ по с. ф. $\Psi_{k,f}$ конечного гамильтониана ($\hat{H}_f = \hat{H}_0 + \hat{V}_0$),

$$\Psi_{n,i} = \sum_k c_{kn} \Psi_{k,f},$$

определяют искомые вероятности перехода:

$$w(n \rightarrow k) = |c_{kn}|^2 = |\langle k, f | n, i \rangle|^2. \quad (2)$$

Рассматривая \hat{V}_0 как малое возмущение, для $\Psi_{k,f}$ можно воспользоваться известным разложением теории возмущений, см.

¹⁴⁾ В связи с данной задачей см. 9.22, где случай внезапных воздействий рассматривается в квазиклассическом приближении.

(VIII. 2), и найти согласно (2)

$$w^{(1)}(n \rightarrow k) = \frac{|\langle k, i | \hat{V}_0 | n, i \rangle|^2}{(E_{n, i} - E_{k, i})^2}, \quad k \neq n. \quad (3)$$

Этот же результат можно получить в рамках нестационарной теории возмущений. Интегрирование в (VIII. 8) по частям дает

$$a_{kn}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar \omega_{kn}} \int_{-\infty}^t e^{i\omega_{kn}t} \frac{\partial V_{kn}}{\partial t} dt - \frac{V_{kn}(t)}{\hbar \omega_{kn}} e^{i\omega_{kn}t}. \quad (4)$$

Применительно к данной задаче $V = V_0 \eta(t)$, где $\eta(t)$ — ступенчатая функция ($\eta(t) = 1$ при $t > 0$ и $\eta(t) = 0$ при $t < 0$). Так как $d\eta(t)/dt = \delta(t)$, то замечаем, что при $t > 0$ первое слагаемое в правой части (4), определяющее вероятность перехода, воспроизводит результат (3) (второе же слагаемое в (4) описывает искажение в. ф. n -го состояния при $t > 0$ под влиянием возмущения V_0 и к переходам системы отношения не имеет).

8.48. Для определения изменения волновой функции под влиянием импульсного воздействия его удобно рассматривать как предельный переход при $\tau \rightarrow 0$ взаимодействия вида $V(t, \tau) = \hat{W}_0 f(t)$, где функция $f(t)$ отлична от нуля лишь при $|t| < \tau$, а интеграл от нее в пределах от $-\tau$ до τ равен 1. Уравнение Шрёдингера при $|t| < \tau$ принимает вид $i\hbar \dot{\Psi} = \hat{W}_0 f(t) \Psi$ (слагаемое \hat{H}_0 в гамильтониане опущено, так как оно не дает изменения в. ф. за бесконечно малый промежуток времени τ ; в учтенном же слагаемом при этом $f(t) \sim 1/\tau \rightarrow \infty$). Решение этого уравнения

$$\Psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{-\tau}^t f(t') dt' \hat{W}_0\right) \Psi(-\tau). \quad (1)$$

Положив здесь $t = \tau$ и устремляя $\tau \rightarrow 0$, находим искомое изменение волновой функции

$$\Psi(t = 0+) = \exp(-i\hat{W}_0/\hbar) \Psi(t = 0-). \quad (2)$$

Учитывая, что по условию задачи $\Psi(0-) = \Psi_n^{(0)}$, находим искомые вероятности

$$w(n \rightarrow k) = \left| \int \Psi_k^{(0)*} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{W}_0\right) \Psi_n^{(0)} d\tau_q \right|^2. \quad (3)$$

Разложение экспоненты в ряд в случае малого возмущения, когда $|(\hat{W}_0)_{kn}| \ll \hbar$, дает

$$w^{(1)}(n \rightarrow k) = \frac{1}{\hbar^2} |(\hat{W}_0)_{kn}|^2, \quad k \neq n,$$

что совпадает с результатом стационарной теории возмущений, получающимся непосредственным (благодаря δ -функции) интегрированием в формуле (VIII. 8).

Воздействие вида $V(x, t) = -xP_0\delta(t)$ на классическую частицу состоит в мгновенной передаче ей импульса $P_0 = \int F(t) dt$. Это утверждение остается справедливым и в квантовой механике, что следует из формулы (2). Действительно, в. ф. состояний частицы в импульсном представлении непосредственно до: $a_i(p) = \langle p | t = 0 - \rangle$, и сразу после: $a_f(p) = \langle p | t = 0 + \rangle$, воздействия связаны соотношением $a_f(p) = a_i(p - P_0)$, что и отражает отмеченное выше обстоятельство об изменении импульса частицы.

8.49. Согласно формуле (2) из 8.47 находим

$$\omega(0 \rightarrow k) = \frac{4ab^3}{\pi^2 [a^2(k+1)^2 - b^2]^2} \sin^2 \frac{\pi(k+1)a}{b}.$$

Условие применимости: $\tau\omega_{k0} = \pi^2\hbar\tau(k+1)^2/ma^2 \ll 1$.

8.50. а) Используя выражение

$$\Psi_0(x, \alpha) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|}, \quad \text{где } \kappa = m\alpha/\hbar^2,$$

для в. ф. основного состояния частицы в δ -яме, см. 2.7, согласно общей формуле (2) из 8.47 для вероятностей переходов при внезапных воздействиях на систему, находим вероятность того, что частица останется связанной ямой

$$\omega_0 \equiv \omega(0 \rightarrow 0) = \left| \int \Psi_0^*(x, \bar{\alpha}) \Psi_0(x, \alpha) dx \right|^2 = \frac{4\alpha\bar{\alpha}}{(\alpha + \bar{\alpha})^2}. \quad (1)$$

б) Для рассмотрения переходов в состояния непрерывного спектра в качестве с. ф. конечного гамильтониана удобно выбрать в. ф. $\Psi_{k, I}(x)$, отвечающие состояниям с определенной четностью I . Такие функции, нормированные на δ -функцию по $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$, получены в задаче 8.44. Используя выражения для них, согласно очевидному обобщению формулы (2) из 8.47 на случай состояний непрерывного спектра, находим

$$\begin{aligned} d\omega(k) &= \left| \int \Psi_{k, I=+1}^*(x, \bar{\alpha}) \Psi_0(x, \alpha) dx \right|^2 dk = \\ &= \frac{4}{\pi} \frac{\kappa(\kappa - \bar{\kappa})^2 k^2 dk}{(\kappa^2 + k^2)^2 (\bar{\kappa}^2 + k^2)}. \end{aligned} \quad (2)$$

Это выражение, как и следует, нормировано на значение, равное $1 - \omega_0$, где ω_0 определяется формулой (1). Переходы происходят только в четные конечные состояния, при этом вероятности значений импульса $p = \pm\hbar k$ одинаковые. Как видно из (1) и (2), в случае $\alpha \approx \bar{\alpha}$ вероятность вылета частицы мала, а при зна-

чениях $\bar{\alpha} \ll \alpha$ и $\bar{\alpha} \gg \alpha$, наоборот, мала вероятность частице остаться в связанном состоянии.

8.51. Для расчета искомой вероятности перейдем в систему координат K' , движущуюся вместе с ямой, в которой $x' = x - Vt$. В. ф. частицы непосредственно сразу после начала движения ямы в исходной, $\Psi_0(x)$, и в движущейся, $\tilde{\Psi}_0(x')$, системах координат имеют вид

$$\tilde{\Psi}_0(x') = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} mVx'\right) \Psi_0(x'), \quad \Psi_0(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|},$$

$\kappa = m\alpha/\hbar^2$, см. 2.7 (здесь соотношение между в. ф. отражает тот факт, что преобразование в. ф. состоит просто в замене импульса p на $p' = p - mV$, сравнить с 6.26). Так как в. ф. связанного состояния частицы в системе K' получается из $\Psi_0(x)$ с помощью замены x на x' , то искомая вероятность согласно формуле (2) из 8.47 оказывается равной

$$w_0 = \left| \int \Psi_0^*(x') \tilde{\Psi}_0(x') dx' \right|^2 = \frac{1}{(1 + V^2/4v_0^2)^2},$$

где $v_0^2 = \alpha^2/\hbar^2$ (заметим, что v_0^2 совпадает с \bar{v}^2 — средним значением квадрата скорости в основном состоянии частицы в δ -яме). В случае $V \ll v_0$ имеем $w_0 \approx 1 - V^2/2v_0^2 \approx 1$ — частица с подавляющей вероятностью увлекается ямой. В обратном предельном случае $V \gg v_0$, наоборот, $w_0 \approx (2v_0/V)^4 \ll 1$, так что частица с подавляющей вероятностью покидает яму.

8.52. Искомые вероятности $w(0 \rightarrow n) = |\langle n, f | 0, i \rangle|^2$, см. формулу (2) из 8.47. Наиболее просто матричный элемент можно вычислить, воспользовавшись формализмом операторов рождения и уничтожения \hat{a}^+ , \hat{a} , сравнить с 6.25. Для невозмущенного осциллятора $\hat{a}_i = (2\hbar)^{-1/2}(\lambda x + i\lambda^{-1}\hat{p})$, где $\lambda = \sqrt{m\omega}$; при этом его основное состояние определяется соотношением $\hat{a}_i |0, i\rangle = 0$. Наложение электрического поля эквивалентно смещению точки равновесия осциллятора на расстояние $x_0 = e\mathcal{E}/m\omega^2$, так что теперь $\hat{a}_f = \hat{a}_i - \lambda(2\hbar)^{-1/2}x_0$, а конечные (при $t > 0$, после наложения поля) стационарные состояния определяются соотношениями

$$|n, f\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_f^+)^n |0, f\rangle, \quad \hat{a}_f |0, f\rangle = 0.$$

Коэффициенты в разложении $|0, i\rangle = \sum_n c_n |n, f\rangle$ были вычислены в 6.25. Воспользовавшись их значениями, находим искомые

$$w(0 \rightarrow n) = |c_n|^2 = \frac{1}{n!} \alpha^{2n} e^{-\alpha^2}, \quad \alpha = -\frac{\lambda x_0}{\sqrt{2\hbar}} \quad (1)$$

(как видно, зависимость вероятностей от номера n квантового состояния осциллятора описывается распределением Пуассона).

8.53. Поступим, как и в предыдущей задаче. Переход в движущуюся со скоростью V систему соответствует изменению импульса частицы на $-mV$, так что теперь $\hat{a}_f = \hat{a}_i - imV/\sqrt{2\hbar\lambda}$ и распределение вероятностей определяется формулой (1) предыдущей задачи, в которой следует положить $|\alpha| = mV/\sqrt{2\hbar\lambda}$.

8.54. Запишем волновую функцию системы в виде разложения¹⁵⁾

$$\Psi(q, t) = \sum_n C_n(t) \Psi_n(q, t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'\right), \quad (1)$$

где $\Psi_n(q, \lambda(t))$, $E_n(\lambda(t))$ — с. ф. и с. з. «мгновенного» (т. е. в данный момент времени) гамильтониана, для которых

$$\hat{H}(\hat{p}, q, \lambda(t)) \Psi_n(q, \lambda(t)) = E_n(\lambda(t)) \Psi_n(q, \lambda(t)), \quad (2)$$

а коэффициенты $C_n(t)$ являются в. ф. в требуемом представлении. Подставив (1) в у. Ш., умножив обе части этого уравнения на $\Psi_k^*(t)$ слева и проинтегрировав по координатам q с использованием ортогональности в. ф. $\Psi_n(q, t)$, находим

$$\dot{C}_k(t) = - \sum_n C_n(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t (E_k - E_n) dt'\right] \int \Psi_k^* \dot{\Psi}_n dq. \quad (3)$$

Это и есть искомое волновое уравнение¹⁶⁾. Оно удобно для исследования систем, гамильтониан которых медленно изменяется со временем. Действительно, так как $\dot{\Psi}_n = \dot{\lambda} \partial \Psi_n / \partial \lambda$, то $\langle \Psi_k | \dot{\Psi}_n \rangle \propto \dot{\lambda} \ll 1$ и в нулевом приближении правую часть в

¹⁵⁾ Для краткости записи пишем $\Psi_n(q, t)$ вместо $\Psi_n(q, \lambda(t))$, причем зависимость от координат q часто не указываем.

¹⁶⁾ Его, естественно, можно записать в виде уравнения Шрёдингера, $i\hbar \dot{C}_k = \sum_n H''_{kn} C_n \equiv \hat{H}'' C_k$. При этом оператор (матрица) \hat{H}'' является эрмитовым и описывает гамильтониан системы в энергетическом представлении мгновенного гамильтониана (однако связь его с исходным гамильтонианом ввиду зависимости от времени соответствующего унитарного преобразования заранее не очевидна, сравнить с 6.28).

(3) можно положить равной нулю и получить

$$C_n(t) = C_n^{(0)} = \text{const}, \quad (4)$$

что можно охарактеризовать как (приближенное) сохранение номера квантового состояния при адиабатическом изменении гамильтониана системы. Этот результат является квантовомеханическим аналогом адиабатической инвариантности величины

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint p dq,$$

в классической механике, см. [26]. Последнее обстоятельство становится особенно наглядным в квазиклассическом случае, см. следующую главу, если иметь в виду *правило квантования Бора — Зоммерфельда*.

В заключение подчеркнем следующее обстоятельство. Несмотря на медленность изменения гамильтониана, за достаточно длительное время он может измениться очень существенно (даже иметь мало общего с первоначальным гамильтонианом). Тем не менее, если система в начальный момент времени находилась в n -м квантовом состоянии, то и в последующие моменты времени она с подавляющей вероятностью будет находиться в том же по счету квантовом состоянии, но уже с в. ф. $\Psi_n(q, \lambda(t))$ (другими словами, при адиабатическом изменении гамильтониана система успевает «подстраиваться» под его изменение).

8.55. Уточним условия, при которых справедлив результат (4) предыдущей задачи, преобразовав сначала матричный элемент $\langle \Psi_k | \dot{\Psi}_n \rangle$ из (3). Для этого продифференцируем по λ обе части уравнения (2) из 8.54, затем умножим слева на Ψ_k^* и проинтегрируем по координатам. Учитывая при этом эрмитовость \hat{H} , получаем

$$\int \Psi_k^* \dot{\Psi}_n dq = \frac{1}{E_n(t) - E_k(t)} \int \Psi_k^* \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right) \Psi_n dq, \quad k \neq n \quad (1)$$

(точнее: при $E_k \neq E_n$). В случае же $n = k$ изменением фазового множителя у с. ф. $\Psi_n(t)$ всегда можно добиться обращения $\langle \Psi_n | \dot{\Psi}_n \rangle$ в нуль¹⁷). Таким образом, уравнение (3) из 8.54 принимает вид

$$\dot{C}_k(t) = \sum_n' \frac{1}{\hbar \omega_{kn}(t)} \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right)_{kn} \exp \left[i \int_0^t \omega_{kn}(t') dt' \right] C_n(t) \quad (2)$$

(слагаемое с $n = k$ в сумме отсутствует, $\hbar \omega_{kn} = E_k - E_n$).

¹⁷) Так, для вещественной собственной функции имеем

$$\langle \Psi_n | \dot{\Psi}_n \rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \int \Psi_n^2 dq = 0.$$

Если производная $\partial \hat{H}/\partial t$ достаточно мала, то $\dot{C}_k \approx 0$ и

$$C_k \approx C_{kn}^{(0)} = \text{const} = \delta_{kn}$$

по условию задачи. В следующем приближении адиабатической теории возмущений согласно (2) для $k \neq n$ имеем

$$\dot{C}_{kn}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar \omega_{kn}(t)} \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right)_{kn} \exp \left(i \int_0^t \omega_{kn}(t') dt' \right)$$

и, интегрируя при заданном начальном условии, получаем

$$C_{kn}^{(1)}(t) = \int_{t_0}^t \frac{1}{\hbar \omega_{kn}(t')} \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t'} \right)_{kn} \exp \left(i \int_0^{t'} \omega_{kn}(t'') dt'' \right) dt'. \quad (3)$$

Оценка $C_{kn}^{(1)}$ дает

$$|C_{kn}^{(1)}| \sim \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \frac{1}{\omega_{kn}} \right| |E_k - E_n|.$$

Справа стоит отношение изменения гамильтониана за время порядка борковского периода ω_{kn}^{-1} к разности энергий соответствующих уровней, и именно малость этого отношения характеризует ситуацию, когда изменение гамильтониана можно считать медленным (*адиабатическим*). Подчеркнем, что если при изменении $\hat{H}(t)$ со временем возникает сближение уровней, так что $E_k(t') \approx E_n(t')$, то адиабатичность нарушается и именно в эти моменты времени переходы в системе между n - и k -состояниями происходят наиболее интенсивно.

Для осциллятора в электрическом поле,

$$\hat{H} = \hat{p}^2 / 2m + kx^2 / 2 - e\mathcal{E}(t)x,$$

с. ф. и с. з. мгновенного гамильтониана приведены в 2.2. При этом $\partial \hat{H} / \partial t = -e\dot{\mathcal{E}}x$, а матричный элемент $(\partial \hat{H} / \partial t)_{k0}$ для значений $k \neq 0$ отличен от нуля лишь при $k = 1$ и равен $-ea\dot{\mathcal{E}}/\sqrt{2}$, где $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$. По формуле (3) получаем (положено $t_0 = -\infty$)

$$C_{10}^{(1)}(t = +\infty) = -\frac{ea}{\sqrt{2} \hbar \omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} e^{i\omega t} dt. \quad (4)$$

Соответственно вероятность единственного разрешенного в первом порядке адиабатической теории возмущений перехода

$$W(0 \rightarrow 1) = |C_{10}^{(1)}|^2 = \frac{e^2 a^2}{2\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{i\omega t} dt \right|^2$$

(здесь, считая, что электрическое поле выключается при $t \rightarrow +\infty$, при подстановке (4) выполнено интегрирование по частям). Этот результат по форме совпадает с полученным ранее в 8.33 в рамках обычной нестационарной теории возмущений¹⁸⁾ и мало отличается от точного, см. 6.25 при $W \ll 1$. Значения вероятностей перехода для указанных в условии зависимостей $\mathcal{E}(t)$ совпадают в приведенными в 8.33.

8.56. В адиабатическом приближении (см. предыдущую задачу) собственные функции мгновенного гамильтониана с соответствующим выбором временной зависимости фазового множителя:

$$\Psi_{\varepsilon_n}(q, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\lambda(t)) dt\right) \Psi_n(q, \lambda(t)) \quad (1)$$

удовлетворяют (приближенно) уравнению Шрёдингера и описывают КЭС (при этом предполагается, что фазовый множитель в самих с.ф. Ψ_n выбран так, что $\dot{\Psi}_n \sim \dot{\lambda}$). Преобразовав следующим образом показатель экспоненты:

$$\int_0^t E_n dt = \int_0^t (E_n(t) - \bar{E}_n) dt + \bar{E}_n t,$$

замечаем, что значение квазиэнергии этих состояний равно

$$\varepsilon_n = \bar{E}_n = \frac{1}{T} \int_0^T E_n(\lambda(t)) dt, \quad (2)$$

т. е. совпадает со средним за период изменения гамильтониана значением $E_n(t)$. Разложение периодической функции

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t (E_n(t) - \bar{E}_n) dt\right] \Psi_n(q, \lambda(t))$$

¹⁸⁾ Причиной совпадения результата адиабатического приближения (условия применимости которого: $\tau \gg \omega^{-1}$, $ea\mathcal{E}/\hbar\omega^2 \tau \ll 1$) с результатом теории возмущений (условие применимости: $ea\mathcal{E} \ll \hbar\omega$) является специфическое действие однородного поля на осциллятор, сводящееся фактически лишь к сдвигу «точки подвеса».

в ряд Фурье определяет квазиэнергетические гармоники КЭС, см. 6.40.

8.57. Вероятность того, что частица останется связанной, равна $1/2$. Имея в виду сохранение четности, удобно отдельно анализировать временную зависимость четной и нечетной составляющих в. ф. Обозначив через $\Psi_0(x)$ в. ф. связанного состояния в случае одной δ -ямы, $U = -\alpha\delta(x)$, см. 2.7, и считая для определенности, что при $t \rightarrow -\infty$ частица была связана правой ямой, запишем в. ф. начального состояния в виде $\Psi(t = -\infty) = (\Psi_+ + \Psi_-)/\sqrt{2}$, где

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \Psi_0 \left(x - \frac{L(-\infty)}{2} \right) \pm \Psi_0 \left(x + \frac{L(-\infty)}{2} \right) \right\}.$$

При большом расстоянии между ямами, $L(-\infty) = \infty$, как четная Ψ_+ , так и нечетная Ψ_- составляющие в. ф. описывают связанную частицу с энергией, равной энергии в поле одной ямы (уровень двукратно вырожден).

Теперь заметим, что каким бы ни был закон «сближения» ям, можно утверждать, что когда ямы сливаются в одну, нечетная составляющая в. ф. описывает уже несвязанную частицу. Это вызвано тем, что в поле одной δ -ямы имеется только одно, четное состояние д. с. (при сближении ям до такого расстояния, когда дискретный нечетный уровень сливается с континуумом, адиабатическое приближение для нечетной части в. ф. уже неприменимо).

Временная зависимость четной составляющей в. ф. существенно зависит от характера сближения ям, но если он носит адиабатический характер, то частица будет оставаться в основном, связанном состоянии. Так как для начального состояния вероятность нахождения частицы в четном состоянии равна $1/2$, то вероятность частице остаться связанной при медленном сближении ям также равна $1/2$, что и было указано в начале решения. Условие применимости полученного результата: $|L| \ll \alpha/\hbar$. Фактически это условие должно выполняться лишь, когда ямы сближаются на расстояние порядка размера области локализации частицы в основном состоянии для δ -потенциала, т. е. $L \ll \hbar^2/m\alpha$. На больших расстояниях такого жесткого ограничения на скорость сближения ям уже нет, так как в этом случае частица, локализованная вблизи одной из ям, наличия другой уже не «чувствует», а при движении ямы с произвольной (но постоянной) скоростью в соответствии с принципом относительности никаких переходов не происходит (фактически на расстояниях $L \gg \hbar^2/m\alpha$ требуется лишь, чтобы не было слишком большим ускорение \dot{L}).

8.58. Введем $\Psi_{n_1}(x, \xi)$ и $E_{n_1}(\xi)$ — систему с. ф. и спектр с. з. оператора $\hat{H}' = \hat{H}_1(x) + V(x, \xi)$ при фиксированных («закрепленных») значениях координат ξ «медленной» подсистемы, так что

$$[\hat{H}_1(x) + \hat{V}(x, \xi)] \Psi_{n_1}(x, \xi) = E_{n_1}(\xi) \Psi_{n_1}(x, \xi) \quad (1)$$

(они играют роль, аналогичную с. ф. и с. з. мгновенного гамильтониана при рассмотрении адиабатических воздействий на систему, см. задачи 8.54 и 8.55). Для точных с. ф. полного гамильтониана системы справедливо разложение вида

$$\Psi_N = \sum_{n_1} \Phi_{Nn_1}(\xi) \Psi_{n_1}(x, \xi).$$

Существенным для дальнейшего является то обстоятельство, что для «быстрой» подсистемы изменение состояния «медленной» выступает как адиабатическое воздействие, при котором сохраняется номер квантового состояния, см. 8.54. Пренебрегая переходами, приходим к приближенному выражению для в. ф. системы, соответствующему учету лишь одного члена в приведенной выше сумме:

$$\Psi_N \approx \Psi_{n_1 n_2}(x, \xi) = \Phi_{n_1 n_2}(\xi) \Psi_{n_1}(x, \xi). \quad (2)$$

Записав уравнение Шрёдингера

$$(\hat{H}_1 + V(x, \xi) + \hat{H}_2) \Phi_{n_1 n_2}(\xi) \Psi_{n_1}(x, \xi) \approx E_{n_1 n_2} \Phi_{n_1 n_2}(\xi) \Psi_{n_1}(x, \xi)$$

и учтя в нем соотношение (1), проделаем следующие преобразования. Умножим обе части получающегося уравнения на $\Psi_{n_1}^*$ слева, проинтегрируем по координатам x «быстрой» подсистемы и пренебрежем действием оператора ¹⁹⁾ $\hat{H}_2(\xi)$ на переменную ξ , входящую в в. ф. $\Psi_{n_1}(x, \xi)$ (т. е. положим $\hat{H}_2 \Phi \Psi \approx \Psi \hat{H}_2 \Phi$; здесь опять проявляется различие характерных времен движения рассматриваемых подсистем); в результате приходим к уравнению Шрёдингера для «медленной» подсистемы

$$(\hat{H}_2(\xi) + E_{n_1}(\xi)) \Phi_{n_1 n_2}(\xi) = E_{n_1 n_2} \Phi_{n_1 n_2}(\xi). \quad (3)$$

Как видно, в рассматриваемом приближении взаимодействие ее с «быстрой» подсистемой характеризуется эффективным потенциалом, в роли которого выступает $U_{эф}(\xi) = E_{n_1}(\xi)$.

¹⁹⁾ Аналогия со случаем адиабатического воздействия на систему, рассмотренным в 8.54, 8.55, проявляется в том, что там при вычислении производной $\partial \Psi / \partial t$ можно было опустить слагаемое, получающееся дифференцированием по времени с. ф. $\Psi_n(q, \lambda(t))$ мгновенного гамильтониана.

Формулы (1)—(3) составляют основу *адиабатического приближения* для стационарных состояний. Применительно к указанному в условии потенциалу, ввиду $b \gg a$, в роли «быстрой» подсистемы выступает движение частицы вдоль оси x , а в роли «медленной» — движение вдоль оси y . При фиксированном y движение вдоль оси x — движение в бесконечно глубокой яме шириной $a(y) = 2a \sqrt{1 - y^2/b^2}$, так что

$$\Psi_{n_1} = \sqrt{\frac{2}{a(y)}} \sin \left(\frac{\pi(n_1 + 1)}{a(y)} \left(x + \frac{a(y)}{2} \right) \right),$$

$$E_{n_1}(y) = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{2ma^2(y)}.$$

При этом согласно (3) движение вдоль оси y происходит в эффективном потенциале

$$U(y) = E_{n_1}(y) = \hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2 b^2 / 8ma^2 (b^2 - y^2), \quad |y| < b.$$

Для такого потенциала в.ф. не слишком сильно возбужденных уровней локализованы на расстояниях $|y| \ll b$, где его можно разложить в ряд:

$$U(y) \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{8ma^2 b^2} y^2.$$

При этом задача вычисления в.ф. $\Phi_{n_1 n_2}(y)$ и уровней $E_{n_1 n_2}$ сводится к задаче о гармоническом осцилляторе, что позволяет получить

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2 \pi (n_1 + 1)}{2mab} \left(n_2 + \frac{1}{2} \right),$$

$$n_{1,2} = 0, 1, \dots$$

$$\Psi_{n_1 n_2} = (2^{n_2} \sqrt{\pi} y_0^{n_2})^{-1/2} \exp \left(-\frac{y^2}{2y_0^2} \right) H_{n_2} \left(\frac{y}{y_0} \right) \Psi_{n_1}(x, y) \quad (4)$$

$$(y_0 = \sqrt{2ab/\pi (n_1 + 1)}, y_0^2 (n_2 + 1/2) \ll b^2)$$

(поучительно убедиться в том, что при воздействии оператора $\hat{H}(y)$ на в.ф. (4) можно пренебречь действием его на функцию $\Psi_{n_1}(x, y)$ в соответствии со сделанным выше замечанием).

8.59. Быстрая подсистема — осциллятор с массой m , характеризующийся координатой x . При фиксированном y , координате медленной подсистемы, имеем ($\omega = \sqrt{k/m}$):

$$\Psi_{n_1} \equiv \Psi_{n_1}^{\text{осц}} \left(x + \frac{\alpha y}{k} \right), \quad E_{n_1}(y) = \hbar \omega \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) - \frac{\alpha^2}{2k} y^2.$$

В. ф. и уровни энергии медленной подсистемы определяются согласно уравнению (3) предыдущей задачи; при этом

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \sqrt{\frac{m}{M} \left(1 - \frac{\alpha^2}{k^2} \right)} \left(n_2 + \frac{1}{2} \right);$$

сопоставить с точным результатом для спектра из 2.50, выполнив в нем разложение по малому параметру $\sqrt{m/M}$

8.60. Воспользуемся адиабатическим приближением, см. 8.58. Быстрая подсистема — легкая частица (координата x_1). Ее уровни и в. ф. при фиксированном значении x_2 , координаты тяжелой частицы (медленная подсистема), имеют вид

$$\Psi_{n_1} = \sqrt{\frac{2}{a - x_2}} \sin \frac{\pi (n_1 + 1) (x_1 - x_2)}{a - x_2},$$

$$E_{n_1}(x_2) = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{2m (a - x_2)^2}$$

(считаем для определенности $x_2 < x_1$; в. ф. равна нулю при значениях $x_1 > a$ и $x_1 < x_2$, сравнить с 2.51).

Энергия $E_{n_1}(x_2)$ выступает в роли эффективного потенциала $U(x_2)$ для тяжелой частицы при $0 < x_2 < a$ (вне этого интервала $U = \infty$). Для не слишком сильно возбужденных состояний характерные значения координаты $x_2 \ll a$ и $U(x_2)$ можно разложить в ряд (сравнить с 8.58):

$$U(x_2) \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{ma^3} x_2, \quad x_2 \geq 0.$$

При этом задача вычисления спектра $E_{n_1 n_2}$ и с. ф. $\Phi_{n_1 n_2}(x_2)$ сводится к рассмотренной в 2.8, воспользовавшись результатом которой получаем

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{2ma^2} + \left(\frac{\hbar^5 \pi^4 (n_1 + 1)^4}{2m^2 M a^6} \right)^{1/3} \alpha_{n_2 + 1};$$

$$n_{1,2} = 0, 1, \dots,$$

здесь $-\alpha_k$, где $k = 1, 2, \dots$, — последовательность нулей функции Эйри в порядке возрастания значений $-\alpha_k$.

8.61. Гамильтониан частицы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \frac{1}{2\mu} \hat{p}_z^2 + U(\sqrt{\rho^2 + z^2}),$$

где

$$\hat{H}_t = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} \hat{l}_z + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8\mu c^2} \rho^2$$

является гамильтонианом поперечного движения частицы в однородном магнитном поле, направленном вдоль оси z , с векторным потенциалом $\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathcal{H}\mathbf{r}]$, см. 7.1.

В случае достаточно сильного магнитного поля движение частицы в поперечном направлении определяется, в основном, действием этого поля. При этом $\omega_H = |e|\mathcal{H}/\mu c$ — характерная частота такого движения значительно превосходит частоту продольного движения. Поэтому для решения задачи можно воспользоваться *адиабатическим приближением*, см. 8.58. При этом в роли «быстрой» подсистемы выступает движение частицы в поперечном направлении. Для него действие потенциала $U(r)$ можно рассматривать как возмущение. Соответственно волновые функции «быстрой» подсистемы (при фиксированном значении координаты z продольного движения, характеризующей «медленную» подсистему) в «нулевом» приближении имеют вид

$$\Psi_{n_1} \equiv \Psi_{nm}(\mathbf{r}) \approx \Psi_{nm}^{(0)}(\rho) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_H |m|!} \left[\frac{(n_\rho + |m|)!}{n_\rho!} \right]^{1/2} \times \\ \times x^{|m|/2} e^{-x/2} F(-n_\rho, |m| + 1, x) \quad (1)$$

(они не зависят от z), где

$$x = \rho^2/2a_H^2, \quad a_H = \sqrt{\hbar/\mu\omega_H}, \quad n = n_\rho + (|m| - em/|e|)/2.$$

Энергетические уровни «быстрой» подсистемы в первом порядке теории возмущений описываются выражениями

$$E_{n_1}(z) \equiv E_{nm}(z) \approx E_n^{(0)} + E_{nm}^{(1)}(z); \quad E_n^{(0)} = \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right), \\ E_{nm}^{(1)}(z) = \int_0^\infty U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) |\Psi_{nm}^{(0)}(\rho)|^2 2\pi\rho d\rho; \quad (2)$$

здесь $E_n^{(0)}$ определяет уровни Ландау.

Теперь согласно 8.58 окончательное определение волновых функций частицы, $\Psi_{n_1 n_2} \equiv \Psi_{nm}(\mathbf{r}) \Psi_{n_2}(z)$, и энергетического спектра $E_{n_1 n_2} \equiv E_{nm n_2}$ связанных состояний сводится к решению одномерного уравнения Шрёдингера в эффективном потенциале, совпадающем с $E_{nm}(z)$. Свойства таких связанных состояний существенно зависят как от вида исходного потенциала $U(r)$, так и от квантовых чисел n , m , характеризующих поперечное движение («быструю» подсистему).

Рассмотрим некоторые частные случаи.

1) Наиболее полное исследование допускает случай «мелкой» сферической ямы $U(r)$ (достаточно произвольного вида)

радиуса R и характерной глубины U_0 , для которой $\mu R^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$ и в отсутствие магнитного поля нет связанных состояний частицы. При этом эффективный потенциал $U_{\text{эфф}} \equiv E_{nm}^{(1)}(z)$ также определяет «мелкую» яму, но уже одномерную. В такой яме для каждой пары квантовых чисел n, m существует, причем только одно, связанное состояние, для которого (сравнить, например, с 2.22)

$$E_{nm0} \approx E_n^{(0)} - \frac{\mu \alpha_{nm}^2}{2\hbar^2}; \quad (3)$$

$$\Psi_0(z) \approx \sqrt{\frac{\mu \alpha_{nm}}{\hbar^2}} \exp\left(-\frac{\mu \alpha_{nm}}{\hbar^2} |z|\right),$$

$$\alpha_{nm} = -2 \int_0^\infty \int_0^\infty U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) |\Psi_{nm}^{(0)}(\rho)|^2 2\pi\rho d\rho dz > 0.$$

Отсюда, в частности, в случае слабого магнитного поля²⁰⁾, для которого $a_H \gg R$, следует

$$\begin{aligned} \alpha_{nm} &\sim -a_H^{-2|m|-2} \iint U(r) \rho^{2|m|+1} d\rho dz \sim \\ &\sim RU_0 \left(\frac{R}{a_H}\right)^{2|m|+2} \sim \mathcal{H}^{|m|+1} \end{aligned} \quad (4)$$

(в интеграле существенны значения $\rho \leq R \ll a_H$, для которых согласно выражению (1) $\Psi_{nm}^{(0)} \sim \rho^{|m|}/a_H^{|m|+1}$), так что энергия связи, равная $\mu \alpha_{nm}^2 / 2\hbar^2$, резко уменьшается с увеличением $|m|$. Подчеркнем, что величина $l_{\parallel} \sim \hbar^2 / \mu \alpha_{nm}$ определяет область локализации координаты z частицы и как легко заметить $l_{\parallel} \gg l_{\perp}$, где $l_{\perp} \sim a_H$ — размер области локализации частицы уже в перпендикулярной магнитному полю плоскости. Таким образом, область локализации частицы имеет спицеобразную («игольчатую») форму. Это свойство сохраняется и при увеличении магнитного поля, когда условие $a_H \gg R$ не выполняется. Спицеобразная форма области локализации волновой функции частицы связана с существенно различными значениями периодов движения вдоль и поперек магнитного поля в условиях применимости адиабатического приближения.

2) Пусть теперь потенциал притяжения $U(r)$ не является слабым, так что $\mu R^2 U_0 / \hbar^2 \gtrsim 1$. Чтобы его можно было рассмат-

²⁰⁾ Подчеркнем, что полученные результаты в случае «мелкой» ямы не предполагают каких-либо ограничений на величину магнитного поля (поле может быть и слабым), сравнить с 7.7.

ривать как возмущение на фоне магнитного поля, последнее должно быть настолько сильным, что выполнено условие $R \gg a_H \approx 1/\sqrt{\hbar\omega}$. При этом для состояний с квантовыми числами $n, m \sim 1$ (точнее, $\sqrt{n}, \sqrt{|m|} \ll R/a_H$, сравнить с 7.2) в выражении (2) можно, вообще говоря, вынести за знак интеграла $U(|z|)$ и получить

$$E_{nm}^{(1)} \approx U(|z|), \quad (5)$$

так что эффективный одномерный потенциал имеет такой же вид, как и исходный центральный потенциал $U(r)$ (см. 4.1 и 2.5 о связи энергетического спектра в симметричном одномерном потенциале $U(|z|)$ со спектром s -уровней в центральном поле $U(r)$).

Замена, приводящая к формуле (5), не оправдана на малых расстояниях $z \lesssim a_H$ для потенциалов с кулоновским (и более сильным) притяжением в связи с возникновением в них в одномерном случае «падения на центр». Оценим положение уровней с $n_2 = 0$ (нижних уровней продольного движения) для водородоподобного атома в сильном магнитном поле. Для этого запишем $E_{nm}^{(1)} \approx -Ze^2/(|z| + a_H)$; по сравнению с (5) здесь введено «обрезание» кулоновского потенциала на малых расстояниях (как будет видно из окончательного результата (6), он слабо зависит от конкретного выбора способа обрезания). Воспользовавшись вариационным методом с пробной волновой функцией вида $\Psi_0 = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|z|}$, где κ — вариационный параметр, находим

$$\begin{aligned} E_{nm0} &\approx E_n^{(0)} + \overline{\hat{H}(z)} = E_n^{(0)} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2\mu} - \kappa \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Ze^2}{|z| + a_H} e^{-2\kappa|z|} dz \approx \\ &\approx E_n^{(0)} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2\mu} - 2\kappa Ze^2 \ln \frac{1}{\kappa a_H}; \end{aligned}$$

для приближенного вычисления интеграла с логарифмической точностью можно заменить экспоненту единицей, а пределы интегрирования $\pm\infty$ значениями $\sim (\pm 1/\kappa)$. Минимум $E_{nm0}(\kappa)$ реализуется при значении κ , приближенно равном

$$\kappa_0 = \frac{2}{a_B} \ln(a_B/a_H), \quad \text{где} \quad a_B = \frac{\hbar^2}{\mu Ze^2}.$$

В результате получаем

$$E_{nm0} \approx \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{2Ze^2}{a_B} \ln^2(a_B/a_H). \quad (6)$$

Подчеркнем, что, как и в предыдущем случае согласно формулам (3), «глубина залегания» уровней продольного движения (при фиксированных квантовых числах n, m) много меньше расстояния $\hbar\omega_H$ между соседними уровнями Ландау.

Сделаем два заключительных замечания. Первое из них связано с возможностью обобщения полученных выше результатов п. 1) о влиянии на уровни Ландау «мелкой» ямы в случае слабого магнитного поля, когда $a_H \gg R$, на произвольный короткодействующий потенциал радиуса R с помощью теории возмущений по длине рассеяния, см. 4.29, 4.31 и 4.11. Для этого заметим, ограничиваясь состояниями с $m = 0$ (об обобщении на значения $m \neq 0$ см. 13.36 и 13.37), что согласно (3) при $a_H \gg R$ интеграл в выражении

$$\alpha_{n0} \approx -\frac{1}{a_H^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} U(r) \rho \, d\rho \, dz$$

лишь коэффициентом μ/\hbar^2 отличается от длины s -рассеяния a_0^B в борновском приближении. Соответственно, замена a_0^B на точную длину рассеяния a_0 в потенциале $U(r)$ дает в случае $a_0 < 0$ искомое обобщение результатов (3); теперь

$$\alpha_{n0} \approx -\frac{\hbar^2 a_0}{\mu a_H^2}, \quad E_{n00} \approx E_n^{(0)} - \frac{1}{2} \mu \omega_H^2 a_0^2 \quad (7)$$

(при $a_0 > 0$ рассматриваемых связанных состояний не возникает, как и в случае отталкивательного потенциала в условиях п. 1)). Эта формула становится неприменимой в случае $|a_0| \gtrsim a_H$, когда в самом (изолированном) потенциале $U(r)$ имеется «мелкий» s -уровень с энергией $\sim \hbar\omega_H$: при этом возникает существенная перестройка спектра уровней Ландау с $m=0$ (т. е. их сдвиги становятся $\sim \hbar\omega_H$, сравнить с 11.4 и 9.3). Подчеркнем, что остальные, «глубокие» уровни как с моментом $l=0$, так и с $l \neq 0$ в потенциале $U(r)$, если они существуют, под влиянием слабого магнитного поля испытывают лишь небольшой сдвиг.

Далее, заметим, что рассматриваемые уровни E_{nmm_2} при совместном действии магнитного поля и потенциала, строго говоря, являются истинно связанными лишь при значениях квантового числа $n_\rho = 0$ (для каждого m). При значениях же $n_\rho \geq 1$ они отвечают квазистационарным состояниям, так как под влиянием потенциала $U(r)$ (приводящего к образованию связанного состояния в продольном направлении) возможен также переход на более низкие уровни $E_{n'}^{(0)}$ поперечного движения с $n'_\rho < n_\rho$, при котором в продольном направлении частица является уже

несвязанной и имеет энергию $E_l \approx \hbar \omega_H (n_p - n'_0)$ (при этом учтена отмеченная ранее малость «глубины залегания» уровней). В случае «мелкой» ямы и слабого магнитного поля, рассмотренном в п. 1), выражение для ширины таких квазистационарных состояний с $m = 0$

$$\Gamma_{n00} \approx \sum_{n'=0}^{n-1} \frac{\mu}{\hbar^3} \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar \omega_H (n - n')}} \alpha_0^3, \quad (8)$$

$$\alpha_0 = -\frac{1}{a_H^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} U(r) \rho \, d\rho \, dz$$

может быть получено аналогично²¹⁾ формуле (3) из задачи 8.44. С помощью указанной выше замены α_0 на длину рассеяния a_0 выражение (8) может быть обобщено на случай «сильного» короткодействующего потенциала.

Наконец, обсудим особенности квантовомеханической задачи о движении частицы в одномерном кулоновском потенциале притяжения $U = -\alpha/|x|$ на всей оси $-\infty < x < +\infty$. Как отмечалось в п. 2), при этом возникает «падение на центр» (в точку $x = 0$): из формулы (6) при радиусе «обрезания» потенциала $a_H \rightarrow 0$ следует $E_0 \rightarrow -\infty$. Дело в том, что гамильтониан частицы

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 - \frac{\alpha}{|x|}, \quad -\infty < x < +\infty \quad (9)$$

при движении на всей оси является эрмитовым, но не самосопряженным оператором. Это связано с тем, что с.ф. гамильтониана при $|x| \rightarrow 0$ имеют вид²²⁾ (справа и слева от точки $x=0$):

$$\Psi_{\pm}(x) = C_{1,\pm} \left\{ 1 - \frac{2|x|}{a_B} \ln \frac{|x|}{a_B} + O\left(x^2 \ln \frac{|x|}{a_B}\right) \right\} + C_{2,\pm} [|x| + O(x^2/a_B)], \quad a_B = \hbar^2/m\alpha^2 \quad (10)$$

²¹⁾ В роли параметра β , определяющего в условиях задачи 8.44 связь двух каналов, теперь выступает

$$\beta_{n_1 n_2 m} = - \int U(r) \Psi_{n_1 m}^*(\rho) \Psi_{n_2 m}(\rho) \, dV,$$

сравнить с α_{nm} из формулы (3).

²²⁾ Обратит внимание на логарифмическое слагаемое и независимость его от энергии; от последней зависят лишь поправочные члены в приведенной асимптотике (10) решений уравнения Шрёдингера, сравнить с 9.14.

и обычное для регулярных потенциалов условие непрерывности волновой функции и ее производной не может быть выполнено в точке $x = 0$, так как $\Psi'_{\pm}(x)$ обращается в бесконечность при $x \rightarrow 0$.

Тем не менее эрмитов оператор (9) допускает самосопряженное расширение. Для введения дополнительных условий, задающих такое расширение оператора, см. 1.29, заметим, что для функций, удовлетворяющих при $|x| \rightarrow 0$ условиям (10), справедливо соотношение

$$\begin{aligned} \int_{\varepsilon}^{\infty} \Psi_2^* \hat{H} \Psi_1 dx + \int_{-\infty}^{-\varepsilon} \Psi_2^* \hat{H} \Psi_1 dx = \\ = \int_{\varepsilon}^{\infty} (\hat{H} \Psi_2)^* \Psi_1 dx + \int_{-\infty}^{-\varepsilon} (\hat{H} \Psi_2)^* \Psi_1 dx + \\ + \frac{\hbar^2}{2m} \{ \Psi_2^*(\varepsilon) \Psi_1'(\varepsilon) - \Psi_2^{*\prime}(\varepsilon) \Psi_1(\varepsilon) - \Psi_2^*(-\varepsilon) \Psi_1'(-\varepsilon) + \\ + \Psi_2^{*\prime}(-\varepsilon) \Psi_1(-\varepsilon) \}, \quad (11) \end{aligned}$$

здесь $\varepsilon > 0$, в котором внеинтегральное слагаемое при $\varepsilon \rightarrow 0$ равно

$$\frac{\hbar^2}{2m} \{ C_{1,+}^{(2)*} C_{2,+}^{(1)} - C_{2,+}^{(2)*} C_{1,+}^{(1)} + C_{1,-}^{(2)*} C_{2,-}^{(1)} - C_{2,-}^{(2)*} C_{1,-}^{(1)} \}, \quad (12)$$

где верхние индексы 1, 2 относятся к волновым функциям $\Psi_{1,2}$. Сохраняя при самосопряженном расширении оператора (9) условие непрерывности волновых функций (10) в точке $x = 0$:

$$C_{1,+}^{(1,2)} = C_{1,-}^{(1,2)}, \quad (13)$$

в дополнение к нему из условия обращения в нуль внеинтегрального слагаемого (12), получаем

$$(C_{2,+}^{(1)} + C_{2,-}^{(1)}) / C_{1,\pm}^{(1)} = \{ (C_{2,+}^{(2)} + C_{2,-}^{(2)}) / C_{1,\pm}^{(2)} \}^* = \beta = \text{const.} \quad (14)$$

Соотношения (13) и (14) более наглядно могут быть записаны в виде

$$\Psi(+0) = \Psi(-0), \quad \{ \Psi'(\varepsilon) - \Psi'(-\varepsilon) \} |_{\varepsilon \rightarrow 0} = \beta \Psi(0). \quad (15)$$

Вещественный параметр β , определяющий условия сшивания решения уравнения Шрёдингера в точке $x = 0$, задает самосопряженное расширение гамильтониана (9). С физической точки зрения возможность выбора различных значений параметра β отвечает различным способам «обрезания» потенциала на ма-

лых расстояниях (сравнить со случаем, рассмотренным в п. 2)). При этом значение β однозначно восстанавливается по положению основного уровня частицы.

Сделаем несколько замечаний в отношении условий (15). Прежде всего отметим, что они справедливы и в том случае, когда потенциал имеет кулоновский вид лишь при $|x| \rightarrow 0$ (и могут быть легко обобщены на случай, когда параметр α в нем имеет различные значения при $x > 0$ и $x < 0$). Далее, внешне они похожи на условия сшивания решения уравнения Шредингера для δ -потенциала, см. 2.6 (и переходят в них при «выключении» кулоновского потенциала на малых расстояниях, когда $\Psi'(x)$ при $|x| \rightarrow 0$ становится ограниченным, т. е. перестает расходиться). Подчеркнем, что параметр β определяет не только энергетический спектр связанных состояний частицы, но и состояния непрерывного спектра (отражение частицы потенциалом).

Найдем теперь дискретный спектр гамильтониана (9) с условиями сшивания (15) решения уравнения Шредингера в точке $x = 0$. Экспоненциально убывающее при $|x| \rightarrow \infty$ решение у. Ш. с энергией $E = -m\alpha^2/2\hbar^2\nu^2$ в одномерном кулоновском потенциале выражается через функцию Уиттекера $W_{\nu, 1/2}(z)$, см. [34]:

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm}(x) &= C_{\pm} W_{\nu, 1/2}(2|x|/\nu a_B) = \\ &= \frac{C_{\pm}}{\Gamma(1-\nu)} \left\{ 1 - \frac{2|x|}{a_B} \ln \frac{2|x|}{\nu a_B} - \right. \\ &\left. - \left[\frac{1}{\nu} + 2\psi(1-\nu) - 2 + 4C \right] \frac{|x|}{a_B} + O\left(\frac{x^2}{a_B^2} \ln \frac{|x|}{a_B}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь $\nu > 0$, $\psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ — логарифмическая производная гамма-функции, $C = 0,5772\dots$ — постоянная Эйлера.

Уровни имеют определенную четность. Для нечетных состояний $\Psi_{\pm}(0) = 0$. Чтобы удовлетворить этому условию, значение выражения в квадратных скобках в (16) должно быть бесконечным. Так как $\psi(z)$ обращается в бесконечность только в точках $z = -k$, где $k = 0, 1, 2, \dots$, причем

$$\psi(z) \approx -(z+k)^{-1} \quad \text{при } z \rightarrow -k, \quad (17)$$

то замечаем, что для нечетных уровней ν принимает значения $\nu_n^- = n$ с $n = 1, 2, \dots$. Соответственно, спектр таких уровней

$$E_n^- = -m\alpha^2/2\hbar^2 n^2$$

совпадает со спектром s -уровней в центральном поле $U = -\alpha/r$ (как и следовало ожидать, см. 4.1 и 2.5).

Для четных уровней частицы согласно выражениям (15) и (16) получаем

$$-\frac{1}{v} - 2\psi(1-v) + 2 - 4\zeta + 2 \ln \frac{v}{2} = \beta a_B. \quad (18)$$

Их спектр существенно зависит от значения параметра β . Ограничимся анализом двух предельных случаев. Пусть $\beta > 0$, причем $\beta a_B \gg 1$. Имея в виду соотношение (17), замечаем, что в этом случае четные уровни лишь слегка сдвинуты вниз относительно нечетных уровней. Записав $v_n^+ = n + \Delta v_n$, согласно уравнению (18) получаем

$$E_n^+ = -m\alpha^2/2\hbar^2 (n + \Delta v_n)^2, \quad \Delta v_n \approx -2/\beta a_B, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (19)$$

причем $|\Delta v_n| \ll 1$. Эта же формула справедлива и в физически более интересном случае $\beta < 0$ с $|\beta| a_B \gg 1$ (см. «обрезание» кулоновского потенциала, рассмотренное в п. 2)). Теперь четные уровни (19) слегка сдвинуты вверх относительно нечетных уровней. Однако в дополнение к ним появляется еще один, «глубокий» уровень E_0^+ , для которого из уравнения (18) находим

$$v_0^+ \equiv v_0 \approx -(\beta a_B + 2 \ln(|\beta| a_B))^{-1} \ll 1 \quad (20)$$

и соответственно

$$E_0^+ = -m\alpha^2/2\hbar^2 v_0^2. \quad (21)$$

Именно этому уровню отвечает второе слагаемое в формуле (6). Определив из него значение параметра β , согласно выражению (19) можно получить спектр четных возбужденных уровней продольного движения для водородоподобного атома в сильном магнитном поле.

Г л а в а 9

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

9.1. а) Для линейного осциллятора элементарное интегрирование в формуле (IX.5) дает $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, что совпадает с точным результатом.

б) Для указанного потенциала интегрирование в (IX.5) с помощью подстановки

$$\text{sh} \frac{x}{a} = \kappa \sin t, \quad \kappa = \sqrt{U_0/|E_n| - 1}$$

позволяет получить

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[\sqrt{\frac{2ma^2 U_0}{\hbar^2}} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2. \quad (1)$$

В точном результате под корнем стоит $2mU_0 a^2/\hbar^2 + 1/4$, так что при значениях $\xi \equiv \sqrt{2mU_0 a^2/\hbar^2} \gg 1$, когда в потенциале

имеется много связанных состояний, квазиклассический и точный результаты мало отличаются друг от друга и для $n \sim 1$. Более того, квазиклассический результат неплохо воспроизводит точный спектр даже в том случае, когда в потенциале имеется всего 3-4 уровня д. с. Действительно, максимальное значение n определяется тем, что $n + 1/2 \leq \xi$, т. е. $n_{\max} \approx \xi$ при $\xi \gg 1$; при этом различие точного и квазиклассического результатов проявляется в слагаемом $\sqrt{\xi^2 + 1/4} - \xi \approx 1/8 \xi$ на фоне квазиклассического выражения $\xi - (n + 1/2)$ в формуле (1).

9.2. Сшивание квазиклассических решений в окрестности правой точки поворота (остановки) $x = b$ производится обычным образом с помощью формул (IX.3). Теперь, однако, выражение для в. ф. при $x < b$ справедливо, вообще говоря, и для значений x , непосредственно примыкающих к левой точке поворота, $x = 0$ (которая уже не является точкой остановки!). Использование граничного условия $\Psi(0) = 0$ приводит к правилу квантования

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m [E_n - U(x)]} dx = \pi \left(n + \frac{3}{4} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (1)$$

Подчеркнем, что изменение условий сшивания отражается лишь на величине квазиклассической поправки: $n + 3/4$ вместо $n + 1/2$ в правиле квантования (IX.5). Заметим также, что соотношение (1) можно получить и из правила Бора — Зоммерфельда, примененного к нечетным уровням в симметричном потенциале $U = U(|x|)$ (т. е. заменив в нем n на $2n + 1$, сравнить с 2.5).

Для потенциала $U = Fx$ при $x > 0$ согласно (1) находим

$$E_n = \left(\frac{9\pi^2}{8} \right)^{1/3} \left(n + \frac{3}{4} \right)^{2/3} \epsilon_0, \quad \epsilon_0 = \left(\frac{\hbar^2 F^2}{m} \right)^{1/3}. \quad (2)$$

Этот квазиклассический результат мало отличается от точного для всех значений n (а не только при $n \gg 1$). Так, значения E_n/ϵ_0 по формуле (2) для $n = 0$ и 1 равны 1,842 и 3,240; точный результат дает 1,856 и 3,245 (квантование согласно (IX.5) приводит, особенно при $n \sim 1$, к существенной потере точности: 1,405 и 2,923 вместо приведенных выше значений).

9.3. Для радиальной функции, $\chi_{n_r} = r R_{n_r, 0}$, s -уровня (см (IV.5)) имеем при $r < b$

$$\chi_{n_r}(r) = \frac{C}{\sqrt{p(r)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^r p dr + \gamma \right], \quad (1)$$

$$p = \sqrt{2m (E_{n_r, 0} - U(r))}$$

($\gamma = 0$ в отсутствие п. н. р.), так что при $r \rightarrow 0$

$$\chi_{n_r}(r) \approx \tilde{C} \left[\sin \gamma + \left(\frac{\rho(0)}{\hbar} \cos \gamma \right) r \right]$$

(при этом ввиду квазиклассичности достаточно учесть зависимость от r лишь в аргументе синуса и заменить $\rho(r)$ на $\rho(0)$). Сравнивая это разложение с граничным условием из 4.10, определяющим п. н. р., находим $\gamma = -\text{arctg}(\rho(0)a_0/\hbar)$. Сшивая теперь согласно (IX.3) функцию (1) с убывающим в классически недоступной области решением, приходим к правилу квантования

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m [E_{n_r,0} - U(r)]} dr = \\ = \pi \left(n_r + \frac{3}{4} + \frac{1}{\pi} \text{arctg} \frac{\rho_{n_r}(0) a_0}{\hbar} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

При $a_0 = 0$ это соотношение определяет спектр $E_{n_r,0}^{(0)}$ для s -уровней в потенциале $U(r)$ (без п. н. р.). В случае $|\rho_{n_r}(0) a_0/\hbar| \ll 1$ значение арктангенса в (2) также мало, соответственно мал и сдвиг уровня. Записав $E_{n_r,0} = E_{n_r,0}^{(0)} + \Delta E_{n_r,0}$ и выполнив разложение радикала в (2)

$$\int_0^b \sqrt{E^{(0)} + \Delta E - U} dr \approx \int_0^{b_0} \left\{ \sqrt{E^{(0)} - U} + \frac{\Delta E}{2 \sqrt{E^{(0)} - U}} \right\} dr,$$

находим сдвиг уровня под влиянием п. н. р.

$$\Delta E_{n_r,0} = \frac{1}{\pi} \omega_{n_r}^{(0)} \rho_{n_r}^{(0)}(0) a_0,$$

где $\omega_{n_r}^{(0)} = \left[\frac{1}{\pi} \int_0^{b_0} \frac{m dr}{\rho_{n_r}^{(0)}(r)} \right]^{-1}$ — частота радиального движения

классической частицы с равным нулю орбитальным моментом в потенциале $U(r)$. Используя соображения о нормировке квазиклассических в. ф. (сравните с (IX.6)), этот результат можно представить в виде ($\Psi = \chi/\sqrt{4\pi r}$)

$$\Delta E_{n_r,0} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left| \Psi_{n_r,00}^{(0)}(0) \right|^2 a_0, \quad (3)$$

что соответствует сдвигу уровня согласно теории возмущений по длине рассеяния, см. 4.29.

В случае $|p_{n,r}(0) a_0/\hbar| \geq 1$, наоборот, сдвиги уровней велики и сравнимы с расстоянием между невозмущенными уровнями в потенциале $U(r)$. Это особенно наглядно видно при значении $a_0 = \infty$. Физическая выделенность этого случая определяется тем обстоятельством, что в п. н. р. имеется «мелкий» реальный (при $a_0 > 0$) или виртуальный (при $a_0 < 0$) уровень с энергией $E_0 \approx -\hbar^2/2ma_0^2$, сравнить с 13.49, такого же порядка величины, как и у рассматриваемых уровней в потенциале $U(r)$ (так что возникает своеобразная резонансная ситуация).

В заключение заметим, что в. ф. (1) относится к случаю $E > U_0$, который только и может реализоваться в отсутствие п. н. р. При наличии п. н. р. следует рассмотреть и значения $E < U_0$. При этом в. ф. при $r > 0$ описывается убывающей «квазиклассической экспонентой» вместо (1). Как легко заметить, такое решение существует лишь при значениях $a_0 > 0$ и отвечает энергии $E_0 = -\hbar^2/2ma_0^2 + U_0$, описывающей сдвинутый на U_0 уровень д. с., имеющийся в изолированном потенциале нулевого радиуса.

9.4. Удобно раздельно исследовать спектры четных и нечетных уровней. Для нечетных состояний $\Psi(0) = 0$. При этом, имея в виду условия сшивания для δ -потенциала из 2.6, замечаем, что производная в. ф. непрерывна в точке $x = 0$. Поэтому частица в нечетных состояниях не «чувствует» δ -потенциала, а спектр нечетных уровней определяется правилом квантования (IX.5) для значений $n = 2k + 1$ (здесь $k + 1$ — порядковый номер нечетного уровня):

$$\int_0^{b_-} \sqrt{2m(E_k^- - U_0(x))} dx = \pi\hbar \left(k + \frac{3}{4}\right). \quad (1)$$

Для четных уровней условие на скачок производной в. ф. принимает вид $\Psi'(0+) = (m\alpha/\hbar^2)\Psi(0)$. Используя при $x > 0$ для в. ф. выражения (IX.3), находим

$$-p(0) \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^b p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right] = \frac{m\alpha}{\hbar} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^b p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right]$$

(ввиду квазиклассичности достаточно дифференцировать лишь по x в аргументе синуса). Отсюда, вводя $\text{tg } \gamma = m\alpha/p(0)\hbar$,

получаем правило квантования для четных уровней с $n = 2k$:

$$\int_0^{b_+} \sqrt{2m [E_k^+ - U_0(x)]} dx = \pi \hbar \left(k + \frac{1}{4} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{m\alpha}{p_k^+(0) \hbar} \right). \quad (2)$$

При $\alpha = 0$ оно воспроизводит спектр четных уровней $E_{0,k}^+$ в потенциале $U_0(x)$. В случае $m\alpha/\hbar p_k^+(0) \ll 1$ сдвиги этих уровней малы (много меньше расстояния между невозмущенными уровнями). Записав $E_k^+ = E_{0,k}^+ + \Delta E_k^+$ и выполнив под интегралом разложение радикала (сравнить с предыдущей задачей), получаем

$$\Delta E_k^+ = \frac{4m\alpha}{T(E_{0,k}^+) \sqrt{2m(E_{0,k}^+ - U_0(0))}}, \quad (3)$$

что совпадает с $\alpha |\Psi_{0,k}^+(0)|^2$ и соответствует результату теории возмущений для $V = \alpha \delta(x)$; здесь $T(E_{0,k}^+)$ и $\Psi_{0,k}^+(0)$ — период движения и в. ф. при $x = 0$ в потенциале $U_0(x)$ для четных состояний (см. (IX.6)).

Рассмотренный выше случай соответствует слабому отражению ($R \ll 1$) от δ -потенциала, коэффициент прохождения которого равен (см. 2.30)

$$D(p) = (1 + m^2 \alpha^2 / \hbar^2 p^2)^{-1}.$$

С увеличением α сдвиги четных уровней возрастают и при значениях $m\alpha/\hbar p_k^+(0) \gg 1$ они сближаются с соседними сверху нечетными уровнями. Это — случай малопроницаемого барьера, $\alpha > 0$. Подставляя

$$p_k^+(0) \approx p_k^-(0) = \sqrt{2m(E_k^- - U_0(0))}$$

в правую часть в соотношении (2) и используя разложение $\operatorname{arctg} x \approx \pi/2 - 1/x$ при $x \gg 1$, находим согласно (2) и (1) расстояние между соседними четным и нечетным уровнями в этом случае:

$$\delta E_k \equiv E_k^- - E_k^+ \approx \frac{4\hbar^2}{m\alpha T(E_k^-)} \sqrt{2m(E_k^- - U_0(0))}, \quad (4)$$

или, учитывая выражение для $D(p)$,

$$\delta E_k = \frac{2\hbar}{\tau(E_k^-)} D^{1/2}(p_k^-(0)). \quad (5)$$

Здесь $\tau(E_k^-) = T(E_k^-)/2$ — период классического движения частицы с энергией E_k^- в потенциале $U_0(x)$, разделенном непроходимым барьером (при $x = 0$). В таком виде (выражение (5)) формула для расщепления уровней в симметричном потенциале носит общий характер и справедлива для малопроницаемого барьера произвольной формы, см. [1, с. 223],

Полученные результаты справедливы и в случае $\alpha < 0$, т. е. для δ -ямы. Теперь четные уровни смещаются вниз, и в случае $m|\alpha|/\hbar p_k^+(0) \gg 1$ четный уровень (с номером $k+1$) сближается уже с нижним соседним нечетным уровнем (с номером k). При этом основной уровень $E_0^+(\alpha)$ с увеличением $|\alpha|$ обладает следующим свойством. Понижаясь, он сначала достигает значения $E_0^+(\alpha_0) = U_0$, а при дальнейшем увеличении $|\alpha|$ переходит уже в основной уровень в δ -яме, сдвинутый на U_0 (сравнить с замечанием, сделанным в конце решения предыдущей задачи).

9.5. Особенность задачи состоит в том, что при решении радиального у. Ш. для функции $\chi = rR$, см. (IV.5), на малых расстояниях, $r \rightarrow 0$, квазиклассичность нарушается. Действительно, при этом $p(r) \approx \sqrt{2m\alpha/r}$ и $d\kappa/dr \propto r^{-1/2} \rightarrow \infty$. Поэтому чтобы учесть граничное условие $\chi(0) = 0$ в правиле квантования, следует найти точное (неквазиклассическое) решение у. Ш. на малых расстояниях и сшить его с квазиклассическим решением (IX.3).

У. Ш. на малых расстояниях принимает вид $\chi'' + \bar{\alpha}\chi/r = 0$, где $\bar{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2$. С помощью подстановок $\chi = \sqrt{r}\varphi$ и $z = 2\sqrt{\bar{\alpha}r}$ получаем из него для функции $\varphi(z)$ уравнение Бесселя с $\nu = 1$ и с учетом граничного условия в нуле находим

$$\chi(r) = A\sqrt{r} J_1(2\sqrt{\bar{\alpha}r}). \quad (1)$$

Асимптотика этой функции при $\sqrt{\bar{\alpha}r} \gg 1$ имеет вид

$$\chi(r) \approx A \left(\frac{r}{\pi^2 \bar{\alpha}} \right)^{1/4} \sin \left(2\sqrt{\bar{\alpha}r} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (2)$$

Теперь замечаем, что для значений r из интервала

$$r \ll \alpha/|E|, \quad 1/\sqrt{\bar{\alpha}} \ll \sqrt{r}$$

уже $|d\kappa/dr| \sim (\bar{\alpha}r)^{-1/2} \ll 1$, т. е. применима квазиклассика¹⁾. Квазиклассическое решение у. Ш. ($p(r) = \sqrt{2m(E - U(r))}$):

$$\chi_{\text{кв}}(r) = \frac{\tilde{C}}{\sqrt{p(r)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_0^r p(r) dr + \gamma \right) \quad (3)$$

¹⁾ При этом считается, что на таких расстояниях еще по-прежнему $U \approx -\alpha/r$, причем значения E отвечают верхним уровням, с $n \gg 1$, в таком потенциале.

на таких расстояниях принимает вид (при этом $p(r) \approx \hbar \sqrt{\bar{\alpha}/r}$)

$$\chi_{\text{кв}}(r) \approx \left(\frac{r}{\bar{\alpha}\hbar^2}\right)^{1/4} \sin(2\sqrt{\bar{\alpha}r} + \gamma), \quad (4)$$

и из условия совпадения его с точным решением (2) находим $\gamma = -\pi/4$ (сравнить со значением $\gamma = \pi/4$, следующим из условия сшивания квазиклассических решений в окрестности левой точки поворота $x = a$ в (IX.4), основанного на линейной аппроксимации потенциала, а также с $\gamma = 0$ в условиях задачи 9.2).

Наконец, условие совпадения квазиклассического решения (3) при $\gamma = -\pi/4$ с решением (IX.3б) (с заменой $\Psi(x)$ на $\chi(r)$), обеспечивающим выполнение граничного условия при $r \rightarrow \infty$, обычным образом (сумма фаз синусов в решениях должна быть кратна π) приводит к правилу квантования

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m(E_{n_r,0} - U(r))} dr = \pi(n_r + 1). \quad (5)$$

Для кулоновского потенциала, $U = -\alpha/r$, отсюда находим

$$E_{n_r,0} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(n_r + 1)^2},$$

что совпадает с точным результатом. Читателю предлагается убедиться в том, что для потенциала Хюльтена из (5) следует также точный результат для спектра s -уровней (см. 4.8).

9.6. Особенность задачи состоит в том, что для потенциала $U(r) \approx \alpha/r^2$ в случае $2m\alpha/\hbar^2 = l(l+1) \ll 1$ на малых расстояниях $r \rightarrow 0$ квазиклассичность нарушается и использование условий сшивания (IX.4) не оправдано. Поступая как и в предыдущей задаче, воспользуемся точным (неквазиклассическим) решением у.Ш. на малых расстояниях, удовлетворяющим граничному условию $\chi(0) = 0$; получаем

$$\chi'' + \left[k_0^2 - \frac{\bar{\alpha}}{r^2}\right] \chi = 0, \quad \chi = A \sqrt{r} J_\nu(k_0 r). \quad (1)$$

Здесь $k_0^2 = 2m(E - U_0(0))/\hbar^2$, при этом потенциал²⁾ $U_0(r)$ заменен его значением $U_0(0)$ в начале координат, $\bar{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2$ и $\nu = \sqrt{\bar{\alpha} + 1/4}$. Воспользовавшись асимптотикой функций Бес-

²⁾ Формулы (1) относятся к одномерному у.Ш. с потенциалом $U(r) = \alpha/r^2 + U_0(r)$, где $U_0(r)$ — плавная функция r . Для центробежного потенциала $\bar{\alpha} = l(l+1)$ и $\nu = l + 1/2$.

селя, замечаем, что на таких расстояниях, где уже $k_0 r \gg 1$ (для значений $\nu \sim 1$), точное решение (1) у. Ш. принимает вид

$$\chi(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi k_0}} A \sin\left(k_0 r - \frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (2)$$

и совпадает с квазиклассическим выражением

$$\chi_{кв} = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi p(r)}} A \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_0^r p dr + \gamma\right\}, \quad (3)$$

$$\gamma = \frac{\pi}{2} \left[\sqrt{\tilde{\alpha}} - \sqrt{\tilde{\alpha} + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2} \right].$$

Действительно, на рассматриваемых расстояниях имеем

$$p(r) \approx \hbar k_0 \sqrt{1 - \tilde{\alpha}/k_0^2 r^2};$$

при этом интеграл в (3) легко вычисляется интегрированием по частям с последующей подстановкой $z = 1/r$ и при $r \gg \sqrt{\tilde{\alpha}}/k_0$ оказывается равным $\hbar(k_0 r - \pi\sqrt{\tilde{\alpha}}/2)$ (отметим, что для свободной частицы, $U_0(r) \equiv 0$, квазиклассическая фаза радиальной в. ф. согласно (3) на больших расстояниях равна $\hbar r - \pi l/2$ и совпадает с точным выражением).

Формула (3) решает проблему учета граничного условия $\chi(0) = 0$ в квазиклассическом решении в классически разрешенной области движения. При $\tilde{\alpha} \rightarrow 0$ также $\gamma \rightarrow 0$ и из (3) следует результат из 9.2. Наоборот, при $\tilde{\alpha} \gg 1$ барьер α/r^2 является уже квазиклассическим, $|d\tilde{\alpha}/dr| \propto \tilde{\alpha}^{-1/2} \ll 1$; при этом $\gamma \approx \pi/4$ в согласии с (IX.46).

Воспользовавшись (3) и обычным условием сшивания (IX.3) для правой точки поворота, приходим к следующему правилу квантования для уровней с моментом l в центральном потенциале $U(r)$, ограниченном в начале координат:

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m \left[E_{n_r l} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - U(r) \right]} dr = \pi \left(n_r + \frac{l}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{l(l+1)} + \frac{3}{4} \right). \quad (4)$$

Отсюда для сферического осциллятора, $U = m\omega^2 r^2/2$, воспользовавшись значением интеграла

$$\int_a^b \frac{1}{x} \sqrt{(b-x)(x-a)} dx = \frac{\pi}{2} (a+b - 2\sqrt{ab}),$$

находим $E_{n_r l} = \hbar\omega(2n_r + l + 3/2)$, что совпадает с точным выражением для спектра, см. 4.5.

Рассмотрим теперь потенциал $U = U_0 \operatorname{tg}^2(\pi x/a)$. При значениях $x \rightarrow \pm a/2$ он принимает вид $U \approx \alpha/r^2$, где $r = (x \mp a/2)$ и $\alpha = U_0 a^2/\pi^2$. Поэтому для учета граничных условий $\Psi(\pm a/2) = 0$ при выводе правила квантования следует воспользоваться аналогичными (3) выражениями для квазиклассической в. ф. в окрестности обеих точек поворота. После этого обычным образом (сумма фаз синусов в квазиклассических решениях кратна π) получаем

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^b \sqrt{2m \left[E_n - U_0 \operatorname{tg}^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right) \right]} dx = \\ = \pi \left[n + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\pi^2 \hbar^2} + \frac{1}{4}} - \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\pi^2 \hbar^2}} \right],$$

сравнить с $\pi(n + 1/2)$ в правой части (IX.5). Вычислив интеграл с помощью подстановки

$$\sin(\pi x/a) = \kappa \sin t, \quad \kappa = (1 + U_0/E_n)^{1/2},$$

находим

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left\{ \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + 2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\pi^2 \hbar^2} + \frac{1}{4}} + \frac{1}{4} \right\},$$

что воспроизводит точный спектр, см. [9]. В связи с полученным результатом заметим, что квантование согласно (IX.5) при значениях $ma/\hbar^2 \leq 1$ приводит к заметной потере точности даже при сравнительно больших n . Так, в случае $U_0 = 0$ (т. е. при переходе к бесконечно глубокой потенциальной яме) для точного спектра $E_n \propto (n+1)^2$, а согласно (IX.5) $E_n \propto (n+1/2)^2$ при $n = 10$ ошибка составляет 10 %.

9.7. В квазиклассических состояниях с $n_r \gg 1$ для характерных значений величины $E_{n_r l} - U(r)$ (кинетической энергии частицы) на расстояниях $r \leq b$ классического движения имеем по порядку величины оценку

$$E_{n_r l} - U \sim \frac{\hbar^2 n_r^2}{mb^2},$$

следующую из правил квантования. При этом в основной области интегрирования в правилах квантования центробежный потенциал выступает как поправка порядка $(l+1/2)^2/n_r^2$, что находится за пределами точности рассматриваемых правил квантования (и может быть опущено). Исключением является область малых расстояний в окрестности левой точки поворота

и именно различие вкладов этой области в значение интеграла и определяет различие квазиклассических поправок в правых частях правил квантования, приведенных в условии задачи.

Для доказательства утверждения разобьем область интегрирования на две: от a (или 0) до c и от c до b , причем выберем³⁾ c таким образом, что: 1) еще можно пренебречь изменением $U(r)$ в области $r < c$ и заменить на $U(0)$ и 2) уже $\hbar^2/mc^2 \ll E_{n_r l} - U(0)$. При этом согласно 2) при интегрировании в пределах от c до b член с центробежным потенциалом может быть опущен, так что эта часть интеграла во всех трех случаях одинакова (при одном и том же $E_{n_r l}$). Воспользовавшись теперь значением интеграла

$$\int_a^c \sqrt{1 - \frac{a}{r^2}} dr = \left[r \sqrt{1 - \frac{a}{r^2}} + \sqrt{a} \arcsin \frac{\sqrt{a}}{r} \right] \Big|_a^c \approx \approx c - \frac{\pi \sqrt{a}}{2}, \quad (1)$$

где $a = \sqrt{a}$, $c \gg a$ (см. замечание в предыдущей задаче по поводу его вычисления), убеждаемся, что, действительно, различие правых частей правил квантования компенсируется разницей интегралов в их левых частях. Отсюда и следует эквивалентность (с квазиклассической точностью) всех трех правил квантования, указанных в условии задачи.

Для сферического осциллятора, $U = m\omega^2 r^2/2$, все они приводят к одинаковому, совпадающему с точным выражению для спектра $E_{n_r l} = \hbar\omega(2n_r + l + 3/2)$ (при этом вычисление особенно элементарно по последнему — без центробежного потенциала — условию квантования, значение интеграла в первых двух условиях см. в предыдущей задаче).

Для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме в рассматриваемых правилах квантования следует произвести очевидную модификацию: заменить $n_r + 1/2$ на $n_r + 3/4$ (как и в 9.2, но теперь она связана уже с правой точкой поворота $x = R$). При этом последнее из правил квантования сразу дает

$$\begin{aligned} \sqrt{E_{n_r l}/\epsilon_0} &= \pi \left(n_r + \frac{l}{2} + 1 \right), \quad \text{т. е.} \\ E_{n_r l} &= \pi^2 \epsilon_0 \left(n_r + \frac{l}{2} + 1 \right)^2, \end{aligned} \quad (2)$$

³⁾ Возможность такого выбора c обеспечивается выполнением условия квазиклассичности $|d\hbar/dr| \ll 1$ на малых расстояниях для движения в потенциале $U(r)$ (без учета центробежного потенциала!).

где $\epsilon_0 = \hbar^2/2mR^2$ ($E_0 = \pi^2\epsilon_0$ — основной уровень), а из квантования по Лангеру, с учетом значения интеграла (1), следует ⁴⁾

$$\sqrt{E_{n_r, l}/\epsilon_0 - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2} + \left(l + \frac{1}{2}\right) \arcsin \left[\left(l + \frac{1}{2}\right) \sqrt{\epsilon_0/E_{n_r, l}} \right] = \pi(n_r + l/2 + 1). \quad (3)$$

Для иллюстрации точности квазиклассического результата приведем, записав $E_{n_r, l} = g_{n_r, l}\epsilon_0$, таблицу значений $g_{n_r, l}$ для ряда квантовых чисел n_r и l , рассчитанных согласно (2) и точных (указанных в скобках). Для точного спектра $g_{n_r, l} = x_{n_r, l}^2$.

l	n_r				
	0	1	2	3	4
1	22,2 (20,2)	61,7 (59,7)	120,9 (118,9)	199,9 (197,9)	298,6 (296,5)
2	39,5 (33,2)	88,8 (82,7)	157,9 (151,9)	246,7 (240,7)	355,5 (349,3)
3	61,7 (48,8)	120,9 (108,5)	199,9 (187,6)	298,6 (286,4)	417,0 (404,9)
4	88,8 (67,0)	157,9 (137,0)	246,7 (226,2)	355,3 (334,9)	483,6 (463,3)

где $x_{n_r, l}$ есть $(n_r + 1)$ -й нуль (не считая $x = 0$) функции Бесселя $J_\nu(x)$ с $\nu = l + 1/2$. Мы специально ограничились небольшими значениями n_r , когда квазиклассика формально неприменима, чтобы подчеркнуть, что и в этом случае квазиклассический результат не слишком сильно отличается от точного. При этом существенно, что выбор квазиклассической поправки в условиях квантования обеспечивает выполнение правильных граничных условий ⁵⁾. В таблице не представлены s -состояния; для

⁴⁾ При значениях $n_r \gg (l + 1/2)$ имеем

$$\delta^2 \equiv (l + 1/2)^2 \epsilon_0/E_{n_r, l} \ll 1$$

и, опуская все поправки, связанные с δ , из (3) приходим к (2). Учет же поправок в этом случае (их вклад порядка $(l + 1/2)^2/n_r$) на фоне $(n_r + l/2 + 1)$ был бы превышением квазиклассической точности правила квантования.

⁵⁾ Как легко убедиться, квантование согласно (IX.5) приводит к существенной потере точности, сравнить с 9.6.

них квазиклассический спектр совпадает с точным, $g_{n_r, 0} = \pi^2 (n_r + 1)^2$. Как видно из таблицы, различие между точным и квазиклассическим значениями $E_{n_r, l}$ при фиксированном l слабо зависит от n_r . Так как следующая квазиклассическая поправка в правой части правила квантования $\sim 1/n_r$ при $n_r \gg 1$, то такое свойство является точным в рассматриваемом случае и «затягивается» до значений $n_r \sim 1$.

Сделаем два заключительных замечания в отношении правила квантования без центробежного потенциала. 1) Так как n_r и l входят в него лишь в виде комбинации $2n_r + l$, то отсюда для квазиклассических состояний следует своеобразное (приближенное) «случайное» вырождение уровней, аналогичное имеющему место для сферического осциллятора при точном решении у.Ш. Конечно, такое вырождение снимается при учете следующей квазиклассической поправки. 2) Обсуждаемое условие квантования относится к потенциалу, ограниченному на малых расстояниях. Однако его можно обобщить и на случай, когда $U(r) \propto r^{-\nu}$ при $r \rightarrow 0$, причем $0 \leq \nu < 2$, если заменить правую часть⁶⁾ в нем значением

$$\pi \left[n_r + \frac{1}{2} + \frac{2l + 1}{2(2 - \nu)} \right]$$

(для ограниченного потенциала $\nu = 0$; сравнить также для $\nu = 1$ и $l = 0$ с 9.5). При этом для кулоновского потенциала, $U = -\alpha/r$, получающийся квазиклассический результат воспроизводит точный спектр для всех значений момента l .

9.8. С известной точностью искомое условие можно получить непосредственно из правила квантования (IX.5), положив в нем $n = N - 1$ (N — порядковый номер уровня) и устремляя E_{N-1} к нулю и соответственно $a \rightarrow -\infty$ и $b \rightarrow +\infty$. При этом, однако, учет квазиклассической поправки $1/2$ на фоне n будет превышением точности. Это связано с тем, что используемое при выводе (IX.5) условие сшивания квазиклассических решений, основанное на линейной аппроксимации потенциала вблизи точек остановки, в данной задаче заведомо неприменимо: точки остановки «уходят» на бесконечность, где при $E = 0$ квазиклассичность нарушается, так как $|d\hbar/dx| \propto |x|$.

Для уточнения значения квазиклассической поправки следует найти точное решение у.Ш. на больших расстояниях, а затем сшить его с квазиклассическим решением. У.Ш. принимает вид

$$\Psi'' + \bar{a}x^{-4}\Psi = 0, \quad U \approx -\alpha/x^4, \quad \bar{a} = 2m\alpha/\hbar^2.$$

⁶⁾ Такая модификация правила квантования может быть получена способом, использованным при решении задачи 9.9.

Отсюда с помощью подстановки $\Psi = \varphi(z)/z$, где $z = \sqrt{\bar{\alpha}}/|x|$ получаем $\varphi''(z) + \varphi(z) = 0$. Так как моменту возникновения нового состояния д. с. при углублении потенциальной ямы отвечает существование не возрастающего при $x \rightarrow \pm\infty$ решения у. Ш. для $E = 0$, см. 2.13, то решение уравнения для $\varphi(z)$ следует выбрать в виде $\varphi = A \sin z$. Таким образом, точная в. ф. в момент возникновения уровня имеет на больших расстояниях вид

$$\Psi(x) \approx A_{\pm} x \sin(\sqrt{\bar{\alpha}}_{\pm}/x), \quad x \rightarrow \pm\infty. \quad (1)$$

Теперь заметим, что на таких больших расстояниях, где $|x| \ll \sqrt{\bar{\alpha}}$, уже выполнено условие квазиклассичности $|d\lambda/dx| \ll 1$ и применима квазиклассика (при этом, естественно, предполагается, что на таких расстояниях потенциал еще описывается асимптотическим выражением, т. е. $U \propto x^{-4}$). В квазиклассическом приближении имеем

$$\begin{aligned} \Psi &= \frac{C_1}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^x p dx + \gamma_1 \right] = \\ &= \frac{C_2}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{\infty} p dx + \gamma_2 \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Значения параметров $\gamma_{1,2}$ находим из сшивания этих квазиклассических решений с найденными выше точными (1), удовлетворяющими требуемым граничным условиям при $x \rightarrow \pm\infty$. Так как при этом $p/\hbar \approx \sqrt{\bar{\alpha}}_{\pm}/x^2$, то очевидно $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$. Теперь из условия совпадения обоих решений в (2) (сумма фаз синусов в них равна πN), приходим к искомому соотношению

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{-2mU(x)} dx = \pi N \quad (3)$$

(непосредственное использование (IX.5), как указано в начале решения задачи, приводит к значению правой части, равному $\pi(N - 1/2)$). Отсюда для потенциала $U = -U_0(x^2/a^2 + 1)^{-2}$ находим

$$\xi \equiv 2mU_0a^2/\hbar^2 = N^2. \quad (4)$$

Точный результат, см. 2.40, получается заменой N^2 на $N^2 - 1$. Как видно, уточненное условие (3), (4) имеет более высокую

точность ⁷⁾, чем полученное непосредственно с помощью (IX.5). Так, значение ξ_N для $N = 10$ согласно (4) отличается от точного на 1 %, а «упрощенное» — на 10 %.

9.9. Поступая как и в предыдущей задаче, запишем сначала квазиклассическое выражение для радиальной функции ($\Psi = Y_{lm}\chi_l(r)/r$) при значении $E = 0$ следующими двумя способами:

$$\begin{aligned} \chi_l(r) &= \frac{C_1}{\sqrt{\tilde{p}}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^r \tilde{p} dr + \gamma_{1l} \right] = \\ &= \frac{C_2}{\sqrt{\tilde{p}}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty \tilde{p} dr + \gamma_{2l} \right], \quad (1) \end{aligned}$$

удобными для учета граничных условий ($\chi_l \propto r^{l+1}$ при $r \rightarrow 0$ и $\chi_l \propto r^{-l}$ при $r \rightarrow \infty$ в момент возникновения связанного состояния, см. 4.26). В выражениях (1) $\tilde{p} = \sqrt{-2mU(r)}$ — радиальный импульс в пренебрежении центробежным потенциалом (обоснование такого приближения для состояний с моментом $l \sim 1$ в области квазиклассичности см. в 9.7). Однако в условиях задачи как на малых, так и на больших расстояниях квазиклассичность нарушается и следует воспользоваться точными решениями у.Ш., сшиванием которых с квазиклассическими решениями (1) позволит найти значения $\gamma_{1(2)l}$ и из совпадения обоих выражений в (1) получить искомое условие возникновения связанных состояний.

У.Ш. как при $r \rightarrow 0$, так и при $r \rightarrow \infty$ принимает вид

$$\chi_l'' + \left[\frac{\tilde{\alpha}}{r^\nu} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0, \quad \tilde{\alpha} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}. \quad (2)$$

Как известно (см., например, [33]), решения этого уравнения выражаются через цилиндрические функции

$$\sqrt{r} Z_s(\beta r^\mu); \quad s = \frac{2l+1}{2-\nu}, \quad \mu = \frac{2-\nu}{2}, \quad \beta = \frac{2\sqrt{\tilde{\alpha}}}{2-\nu}.$$

На малых расстояниях, чтобы удовлетворить граничному условию $\chi_l \propto r^{l+1}$, решение следует выбрать в виде

$$\chi_l = C \sqrt{r} J_{s_1}(\beta_1 r^{\mu_1}).$$

⁷⁾ При этом различие квазиклассического и точного результатов проявляется в слагаемых $\sim 1/N^2$.

Воспользовавшись асимптотикой функции Бесселя $J_s(z)$ при $z \rightarrow \infty$, получаем

$$\chi_l \propto r^{\nu_1/2} \sin \left[\frac{2\sqrt{\tilde{\alpha}_1}}{2 - \nu_1} r^{\mu_1} - \frac{\pi s_1}{2} + \frac{\pi}{4} \right], \quad (3)$$

что соответствует квазиклассическому решению на таких малых расстояниях, где еще $U \approx -\alpha_1/r^{\nu_1}$, но уже можно пренебречь центробежным потенциалом⁸⁾. Сравнение с первым из выражений для χ_l в (1) дает

$$\nu_{1l} = \pi \left[\frac{2l + 1}{2(\nu_1 - 2)} + \frac{1}{4} \right]. \quad (4)$$

Аналогичным образом замечаем, что на больших расстояниях решение уравнения (2) следует выбрать в виде

$$\chi_l = \tilde{C} \sqrt{r} J_{-s_2}(-\beta_2 r^{\mu_2}),$$

и находим значение параметра

$$\nu_{2l} = \pi \left[\frac{2l + 1}{2(2 - \nu_2)} + \frac{1}{4} \right]. \quad (5)$$

Теперь из требования, чтобы оба выражения для χ_l в (1) совпадали (для чего сумма фаз синусов в них должна быть равна πN_l), приходим к искомому условию возникновения N_l -го по счету связанного состояния частицы с моментом l :

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} \sqrt{-2mU(r)} dr = \pi \left[N_l + \frac{2l + 1}{2(2 - \nu_1)} + \frac{2l + 1}{2(\nu_2 - 2)} - \frac{1}{2} \right]. \quad (6)$$

Отметим, что случай $\nu_2 \rightarrow \infty$ соответствует потенциалу с экспоненциальным убыванием на больших расстояниях.

Рассмотрим ряд приложений формулы (6).

1) Для s -состояний в потенциале Хюльтена, $U(r) = -U_0/(e^{r/a} - 1)$, в (6) следует выбрать $\nu_1 = 1$, $\nu_2 = \infty$ и $l = 0$. После вычисления интеграла получаем

$$2ma^2 U_0 / \hbar^2 = N_s^2,$$

что совпадает с точным результатом, см. 4.8.

⁸⁾ Подчеркнем, что зависящая от r часть квазиклассической фазы в выражении (3) не содержит l в соответствии с отмеченным выше обстоятельством, что учет центробежного потенциала в основной области классического движения находится за пределами точности рассматриваемого приближения, сравнить с 9.7.

2) Аналогичным образом для потенциала Юкавы,

$$U = -\frac{\alpha}{r} e^{-r/a}, \text{ получаем согласно (6) } \xi \equiv 2ma/\hbar^2 = \pi N_s^2/2.$$

Отсюда условиям появления нижних 1s-, 2s- и 3s-состояний отвечают значения параметра ξ , равные 1,57; 6,28; 14,14. Точные значения, получаемые численным интегрированием у.Ш., оказываются равными 1,68; 6,45; 14,34.

3) Рассмотрим, наконец, потенциал $U = -\alpha/r(r+a)^2$, для которого $\nu_1 = 1$, $\nu_2 = 3$. Согласно (6) легко находим

$$2ma/\hbar^2 a = (N_l + 2l + 1/2)^2.$$

Для этого потенциала можно найти точное условие появления первого связанного состояния, $N_l = 1$, с произвольным моментом l . В.ф. в момент возникновения такого состояния имеет вид

$$\chi_l = Cr^{l+1} (r+a)^{-2l-1},$$

при этом

$$2ma/\hbar^2 a = (2l+1)(2l+2).$$

Как видно, даже для $N_l = 1$ квазиклассический результат неплохо воспроизводит точное условие при всех значениях момента частицы l .

9.10. Обозначим через $E_n^{(0)}$ и $E_n^{(0)} + \delta E_n$ уровни энергии в полях $U_0(x)$ и $U_0(x) + \delta U(x)$ соответственно. Разлагая подинтегральную функцию в правиле квантования

$$\int_{a+\delta a}^{b+\delta b} \sqrt{2m [E_n^{(0)} + \delta E_n - U_0(x) - \delta U(x)]} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1)$$

с учетом малости δE_n , δU , находим искомое смещение уровня⁹⁾

$$\delta E_n \approx \delta E_n^{(1)} = \frac{2}{T} \int_a^b \frac{\delta U(x)}{v_0(x)} dx, \quad (2)$$

$$v_0(x) = \sqrt{\frac{2}{m} [E_n^{(0)} - U_0(x)]},$$

⁹⁾ Сравнить с 9.3. Заметим, что изменение левой части (1) за счет смещения точек поворота в первом порядке равно нулю. Если $\delta U(x)$ отлично от нуля лишь вне области классического движения частицы, то согласно (2) сдвиг уровня $\delta E_n = 0$. Конечно, сдвиг уровня есть и в этом случае. Однако он, вообще говоря, экспоненциально мал и его расчет требует специального рассмотрения; сравнить с 9.4.

где $T(E_n^{(0)})$ — период движения классической частицы в потенциале $U_0(x)$.

Полученный результат соответствует формуле первого порядка теории возмущений (VIII.1), $\delta E_n^{(1)} = (\delta U)_{nn}$, и также вытекает из нее, если при вычислении матричного элемента возмущения воспользоваться квазиклассическим выражением (IX.6) для невозмущенной в.ф. и заменить под интегралом быстро осциллирующий квадрат синуса его средним значением, равным $1/2$.

Классическая интерпретация соотношения (2) основана на адиабатическом инварианте и состоит в том, что оно описывает изменение энергии $E_n^{(0)}$ (которая в классической теории не квантована!) финитного движения частицы в потенциале $U_0(x)$ при адиабатическом изменении его на $\delta U(x)$. При этом $I = \frac{1}{2\pi} \oint p dx = \text{const}$ см. [26], и в случае малого возмущения потенциала δU отсюда вытекает (2); сравнить с «мгновенным» включением возмущения, рассмотренным в 9.22.

Для осциллятора с ангармоничностью по формуле (2) находим

$$U_0(x) = m\omega^2 x^2/2, \quad E_n^{(0)} = \hbar\omega(n + 1/2), \quad \delta U = \beta x^4,$$

$$\delta E_n = \frac{\omega}{\pi} \int_{-b}^b \frac{\beta x^4 dx}{\sqrt{2E_n^{(0)}/m - \omega^2 x^2}} = \frac{3}{2} \beta \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \left(n^2 + n + \frac{1}{4} \right). \quad (3)$$

Отметим, что учет $1/4$ на фоне $n^2 + n$, строго говоря, является превышением квазиклассической точности (см. в связи с этим 9.13). Действительно, точное выражение для $E_n^{(1)}$ отличается от (3) лишь значением указанной поправки: $1/2$ вместо $1/4$. Как видно, квазиклассический результат неплохо воспроизводит точный и при $n \sim 1$ (исключая лишь случай $n = 0$).

9.11. Сдвиги $\Delta E_n(\mathcal{E})$ невозмущенных уровней $E_n^{(0)}$ определяются правилом квантования

$$\int_{a_1}^{a_2} \sqrt{2m [E_n^{(0)} + \Delta E_n - U(x) + e\mathcal{E}x]} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1)$$

Здесь $V = -e\mathcal{E}x$ — потенциальная энергия частицы с зарядом e в однородном электрическом поле \mathcal{E} . Так как $\Delta E_n \propto \mathcal{E}^2$, то в разложении левой части в (1) по полю \mathcal{E} следует учесть члены второго порядка. Для их вычисления преобразуем левую

часть соотношения (1) следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial E_n^{(0)}} \int_{a_1}^{a_2} \frac{1}{2m} [2m(E_n^{(0)} + \Delta E_n - U(x) + e\mathcal{E}x)]^{3/2} dx &\approx \\ &\approx \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial E_n^{(0)}} \int_{-a}^a \left\{ \frac{p_n^3(x)}{2m} + \frac{3}{2} p_n(x) (\Delta E_n + e\mathcal{E}x) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{3m}{4p_n(x)} (e\mathcal{E}x)^2 \right\} dx, \quad (2) \end{aligned}$$

где $p_n(x) = \sqrt{2m(E_n^{(0)} - U(x))}$, а $\pm a$ — точки остановки для невозмущенного движения. Первый член с $p_n^3(x)$ в разложении (2) воспроизводит правую часть в выражении (1), второй равен $1/2 T(E_n^{(0)}) \Delta E_n$, а третий определяет искомое смещение уровней, так что

$$\Delta E_n \equiv -\frac{1}{2} \beta_n \mathcal{E}^2 = -\frac{me^2 \mathcal{E}^2}{T(E_n^{(0)})} \frac{\partial}{\partial E_n^{(0)}} \int_{-a}^a \frac{x^2 dx}{\sqrt{2m[E_n^{(0)} - U(x)]}}. \quad (3)$$

Здесь $T(E_n^{(0)})$ — период невозмущенного движения, β_n — поляризуемость n -го состояния, определяющая среднее значение дипольного момента системы $d_{nn} = \beta_n \mathcal{E}$, индуцированного внешним электрическим полем.

Согласно (3) поляризуемость равна (при $E = E_n^{(0)}$)

$$\beta(E) = \frac{e^2}{T(E)} \frac{\partial}{\partial E} (T(E) \overline{x^2}), \quad (4)$$

где $\overline{x^2}$ — среднее за период классического движения в потенциале $U(x)$ значение величины x^2 . Классическая интерпретация этого выражения основана на рассмотрении среднего за период значения дипольного момента

$$\begin{aligned} \bar{d}_{\text{клас}}(E) &= \frac{1}{T(E)} \oint \frac{ex}{v(x, E)} dx, \\ v &= \pm \sqrt{2(E - U(x) + e\mathcal{E}x)/m}. \end{aligned}$$

Разлагая здесь, как и в (2), интеграл по степеням \mathcal{E} , приходим к соотношению $\bar{d}_{\text{клас}} = \beta \mathcal{E}$, где β определяется формулой (4) (отметим также, что поляризуемость определяет изменение энергии классической системы при медленном включении

поля, $\Delta E = -1/2\beta\mathcal{E}^2$, в согласии с (3), сравнить с предыдущей задачей).

Для осциллятора $T(E) = \text{const}$, а $\bar{x}^2 = E/m\omega^2$ (как это следует, например, из теоремы вириала); при этом $\beta_n = e^2/m\omega^2$, что совпадает с точным квантовомеханическим результатом, см. 2.2.

Для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме $\beta_n = -e^2 a^2 / 24 E_n^{(0)} < 0$, здесь a — ширина ямы.

9.12. Записав $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$, $U = U_0(x) + V(x)$ и выполнив в формуле (IX.5) разложение способом, аналогичным использованному в предыдущей задаче, находим

$$E_n^{(1)} = \overline{V(x)},$$

$$E_n^{(2)} = \frac{1}{2T(E_n^{(0)})} \frac{\partial}{\partial E_n^{(0)}} \left\{ T(E_n^{(0)}) [(\overline{V(x)})^2 - \overline{(V(x))^2}] \right\}. \quad (1)$$

Здесь черта означает усреднение соответствующей величины по периоду движения классической частицы в потенциале $U_0(x)$ с энергией $E_n^{(0)}$, определяемое соотношением

$$\overline{f(x)} = \frac{2}{T(E_n^{(0)})} \int_a^b \frac{f(x) dx}{v_n(x)}, \quad v_n = \sqrt{\frac{2}{m} [E_n^{(0)} - U_0(x)]}. \quad (2)$$

Для осциллятора, $U_0 = m\omega^2 x^2 / 2$, с ангармоничностью $V = \alpha x^3$ находим $\overline{V(x)} = 0$ и

$$\overline{(V(x))^2} = \frac{\omega}{\pi} \int_{-b}^b \frac{\alpha^2 x^6 dx}{\sqrt{2E_n^{(0)}/m - \omega^2 x^2}} = \frac{5}{2} \alpha^2 \left(\frac{E_n^{(0)}}{m\omega^2} \right)^3.$$

Соответственно $E_n^{(1)} = 0$ и согласно (1)

$$E_n^{(2)} = -\frac{15}{4} \frac{\alpha^2}{m\omega^2} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \left(n^2 + n + \frac{1}{4} \right), \quad (3)$$

что лишь значением последней, равной 1/4, квазиклассической поправки отличается от точного выражения, в котором она равна 11/30 (такое различие согласуется, естественно, с квазиклассической точностью, обеспечиваемой правилом квантования Бора — Зоммерфельда, сравнить с 9.13). При этом квазиклассический результат хорошо воспроизводит точный и для состояний с $n \sim 1$ (исключая лишь случай $n = 0$).

9.13. Искомое уточнение правила квантования может быть получено, если при выводе правила Бора — Зоммерфельда, изложенном в книге Ландау и Лифшица [1], воспользоваться

более точными квазиклассическими волновыми функциями, учитывающими следующую по \hbar квазиклассическую поправку. Укажем, какие при этом возникают изменения в соответствующих формулах из § 47, 48 в [1]. В. ф. справа от правой точки остановки ¹⁰⁾ $x = b$ вместо (47,1) теперь имеет вид

$$\Psi = \frac{C}{2\sqrt{-ip}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx - \frac{i m \hbar}{4} \frac{F}{p^3} - \frac{i \hbar}{24} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_b^x \frac{F^2}{p} dx \right\}, \quad (1)$$

где $F = -dU/dx$; здесь использовано выражение (46,11), записанное в более удобном для дальнейшего виде: малые квазиклассические поправки внесены в показатель экспоненты и учтено соотношение

$$\frac{i \hbar m^2}{8} \int \frac{F^2}{p^5} dx = \frac{i \hbar}{24} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int \frac{F^2}{p} dx$$

(на вещественной оси при $x > b$ значение $p(x)$ — мнимое, причем $ip < 0$). Переходя в область классического движения по контуру в комплексной плоскости x , как и в [1], получаем волновую функцию при ¹¹⁾ $x < b$

$$\Psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx + \frac{m \hbar}{4} \frac{F}{p^3} - \frac{\hbar}{24} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_x^b \frac{F^2}{p} dx + \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (2)$$

Аналогичным образом из сшивания с решением, убывающим при $x \rightarrow -\infty$, находим волновую функцию в области $x > a$

$$\Psi = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{m \hbar}{4} \frac{F}{p^3} - \frac{\hbar}{24} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_a^x \frac{F^2}{p} dx + \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (3)$$

¹⁰⁾ Отметим, что используемое нами обозначение a, b левой и правой точек остановки отличается от принятого в [1].

¹¹⁾ Обращаем внимание на необходимость выбора в интегралах квазиклассического решения (2) в качестве верхнего предела интегрирования точки остановки $x = b$.

и из условия совпадения выражений (2) и (3) приходим к правилу квантования

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p \, dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar}{24} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_a^b \frac{F^2}{p} \, dx. \quad (4)$$

Так как последнее слагаемое выступает здесь как поправка, то записав $E_n = E_n^{\text{Б.}-3} + \Delta E_n$, где ΔE_n — связанное с ним изменение энергии уровня, и выполнив в левой части разложение по ΔE_n (сравнить с 9.3), получаем

$$\Delta E_n = \frac{\hbar^2}{12T(E)} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_a^b \frac{(U'(x))^2 \, dx}{\sqrt{2m(E - U(x))}} \Big|_{E=E_n^{\text{Б.}-3}} \quad (5)$$

(в правой части (4) изменением энергии уровня можно пренебречь), что совпадает с приведенным в условии задачи выражением.

Рассмотрим некоторые приложения формулы (5).

Для осциллятора имеем $U' = m\omega^2 x$; при этом $\overline{(U')^2} = m\omega^2 E$ и так как $T = 2\pi/\omega = \text{const}$ (не зависит от энергии), то находим $\Delta E_n = 0$. Это — естественный результат, так как для осциллятора правило Бора — Зоммерфельда воспроизводит точный спектр и более высокие поправки по \hbar должны отсутствовать.

Для осциллятора с ангармоничностью βx^4 , выполняя в формуле (5) соответствующие разложения, находим для линейной по β части сдвига значение

$$\Delta E_n = 3\beta \hbar^2 / 8m^2 \omega^2,$$

объединяя которое с выражением (3) из 9.10, приходим к результату для поправки первого порядка теории возмущений $E_n^{(1)}$, совпадающему с точным.

Аналогичным образом, для ангармоничности вида $V = \alpha x^3$ по формуле (5) получаем

$$\Delta E_n = -7\alpha^2 \hbar^2 / 16m^3 \omega^4$$

для квадратичной по α части поправки, которая совместно с выражением (3) из 9.12 воспроизводит точный результат второго порядка теории возмущений.

В заключение укажем еще один способ вычисления квазиклассических поправок более высокого порядка по \hbar в правиле квантования, основанный на исследовании эквивалентного

уравнению Шрёдингера нелинейного уравнения

$$\chi' = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E_n) - \chi^2 \quad (6)$$

для логарифмической производной в. ф. $\chi = \Psi'/\Psi$. При этом

$$\chi = -\sqrt{2m(U(x) - E_n)/\hbar^2 - \chi'(x)} \quad (7)$$

(о выборе здесь знака см. ниже).

Интегрируя соотношение (7) по контуру, проведенному в плоскости комплексного переменного x так, что он охватывает отрезок вещественной оси между точками остановки a и b , и используя теорему о вычетах, получаем

$$\oint_C \chi dx = -\frac{1}{\hbar} \oint_C \sqrt{2m(U - E_n) - \hbar^2 \chi'} dx = 2\pi i n. \quad (8)$$

Здесь учтено, что полюсами функции $\chi(x)$ являются нули в. ф., число их равно n , а вычет в каждом из полюсов равен 1.

Соотношение (8) является точным (для аналитических потенциалов) и справедливо при достаточно произвольном выборе контура C . Однако для дальнейших преобразований удобно сначала выбрать его не слишком близко от отрезка вещественной оси между точками остановки. В этом случае в выражениях (7), (8) на контуре интегрирования слагаемое с χ' выступает как поправка. Действительно, непосредственно вблизи отрезка (a, b) на вещественной оси функция $\Psi(x)$ имеет осциллирующий характер, $\Psi \propto \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int p dx + \gamma\right)$ и величины χ' и χ^2 — одного порядка. При удалении же в комплексную плоскость в волновой функции «выживает» лишь одно, растущее экспоненциально слагаемое (сравнить с [1]). При этом $\chi = \Psi'/\Psi$ уже не содержит быстро изменяющегося множителя и производная χ' оказывается малой величиной порядка $d\lambda/dx \ll 1$ по сравнению с χ^2 . Соответственно в этом случае уравнение (6) можно решать последовательными итерациями

$$\chi = \chi^{(0)} + \chi^{(1)} + \chi^{(2)} + \dots$$

и найти

$$\begin{aligned} \chi^{(0)} &= -\frac{i}{\hbar} p_n(x), & \chi^{(1)} &= -\frac{\chi^{(0)'}}{2\chi^{(0)}} = \frac{mU'}{2p_n^2}, \\ \chi^{(2)} &= \chi^{(0)} \left[\frac{\hbar^2 \chi^{(1)'}}{2p_n^2} - \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2 \chi^{(0)'}}{p_n^2} \right)^2 \right] \text{ и т. д.} \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь, как обычно, $p_n = \sqrt{2m(E_n - U(x))}$. Точки остановки a, b для функции $p_n(x)$ являются точками ветвления. Для однозначного определения p_n между ними следует провести разрез вдоль

отрезка (a, b) на вещественной оси x . При этом на верхнем берегу разреза $p_n > 0$ (на нижнем уже $p_n < 0$). Заметим, что можно записать $p_n = -i \sqrt{2m(U(x) - E_n)}$, где фаза $U(x) - E_n$ справа от правой точки остановки b на вещественной оси x выбрана равной нулю; это согласуется с выбором знака в (7), так как $\chi < 0$ при $x > b$. Подчеркнем также, что точки остановки не являются особыми точками (точками ветвления) для точного решения $\chi(x)$!

Подставляя разложение χ в формулу (8), получаем¹²⁾

$$\frac{1}{\hbar} \oint p_n dx = 2\pi \left[n + \frac{1}{2} + \frac{\hbar}{24\pi} \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \int_a^b \frac{(U'(x))^2}{p_n(x)} dx + \dots \right]. \quad (10)$$

Здесь учтено, что¹³⁾

$$\oint \chi^{(1)} dx = -\frac{1}{2} \oint d \ln p(x) = -i\pi,$$

а при преобразовании интеграла от $\chi^{(2)}$ выполнено интегрирование по частям в слагаемом с $\chi^{(1)'}$ и использовано соотношение

$$\oint \frac{(U')^2}{p^5} dx = \frac{1}{3m^2} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \oint \frac{(U')^2}{p} dx = -\frac{2}{3m^2} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_a^b \frac{(U')^2}{p} dx.$$

Правило квантования (10) совпадает с полученным выше другим способом соотношением (4).

9.14. Наиболее общее решение радиального у.Ш. в квазиклассическом приближении в области финитного движения частицы, примыкающей к началу координат, имеет вид ($\Psi_{Elm} = Y_{lm}\chi_{El}/r$)

$$\chi_{El} = \frac{C}{\sqrt{p(r)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^r p dr + \gamma \right), \quad (1)$$

$$p = \hbar \sqrt{\frac{\tilde{\alpha}}{r^{\nu}} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \kappa^2}.$$

¹²⁾ Теперь контур интегрирования уже можно деформировать так, чтобы он непосредственно охватывал отрезок (a, b) вещественной оси. Подчеркнем, что аналитические свойства точного решения и его квазиклассического разложения — различные!

¹³⁾ При этом использована формула $\ln z = \ln|z| + i \arg z$ и учтено, что фаза $p(x)$ при обходе вдоль контура интегрирования изменяется на 2π (при обходе каждой из корневых точек ветвления «набегает» фаза, равная π).

Здесь ¹⁴⁾ $\bar{a} = 2m\alpha/\hbar^2$ и $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$. Так как интеграл в (1) при $r \rightarrow 0$ расходится ($\nu > 2$), то оба независимые решения ведут себя при этом одинаковым образом — с бесконечными осцилляциями синуса — и обеспечивают сходимость нормировочного интеграла на малых расстояниях. Соответственно при произвольном значении E выбором параметра γ всегда можно добиться того, чтобы в. ф. при $r \rightarrow \infty$ убывала в классически запрещенной области. Отсюда, на первый взгляд, и следует вывод об отсутствии квантования энергетического спектра. Однако он является преждевременным. Тонкость здесь в том, что условия *самосопряженного расширения* оператора Гамильтона в рассматриваемом случае как раз и ограничивают определенным образом возможные значения параметра γ . Это обстоятельство особенно наглядно проявляется, если предварительно «обрезать», как указано в условии, потенциал на малом расстоянии r_0 и затем перейти к пределу $r_0 \rightarrow 0$.

При малом, но конечном r_0 имеем граничное условие $\chi(r_0) = 0$. При этом в (1) следует положить $a = r_0$ и $\gamma = 0$, после чего, как обычно, приходим к правилу квантования

$$\int_{r_0}^b \sqrt{2m \left[E_{n_r l} + \frac{\alpha}{r^\nu} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right]} dr = \pi \hbar \left(n_r + \frac{3}{4} \right) \quad (2)$$

(сравнить с 9.2).

Спектр энергетических уровней, следующий из правила квантования (2), зависит от выбора r_0 и по мере уменьшения r_0 обладает двумя характерными особенностями. Во-первых, уровень с данным фиксированным значением n_r опускается вниз, причем для него $E_{n_r l} \rightarrow -\infty$ при $r_0 \rightarrow 0$. Во-вторых, в какой-либо определенной энергетической области $\tilde{E} < E < \tilde{E} + \Delta E$ (с $E < 0$) появляются новые уровни со все большими значениями n_r , так что для них $n_r \rightarrow \infty$ при $r_0 \rightarrow 0$. Хотя положение этих уровней зависит от r_0 и предела для них при $r_0 \rightarrow 0$ не существует, тем не менее расстояние между соседними из них (в указанной области) — вполне определенное и равно $\hbar\omega(E_{n_r l})$, как обычно в квазиклассическом приближении.

Таким образом, энергетический спектр рассматриваемой задачи при значениях $E < 0$ является дискретным, однако нужны дополнительные условия, однозначно фиксирующие положение

¹⁴⁾ Для наглядности считаем, что потенциал имеет вид $U = -\alpha/r^\nu$ во всем пространстве (причем $\nu > 2$). Подчеркнем, что значение нижнего предела интегрирования a в (1) не связано с точкой поворота и может быть выбрано произвольным образом.

уровней (сам по себе потенциал этого не обеспечивает, в отличие от случая $\nu < 2$). Нетрудно заметить, что задание положения лишь одного уровня (при каждом значении момента l) полностью определяет весь спектр. Действительно, написав аналогичное (2) выражение с другим значением \tilde{n}_r , радиального квантового числа и взяв их разность, приходим к соотношению, в котором уже можно положить $r_0 = 0$ и получить условие квантования, определяющее спектр, в виде

$$\int_0^b \sqrt{2m \left[E_{nl} + \frac{\alpha}{r^\nu} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right]} dr - \int_0^{\tilde{b}} \sqrt{2m \left[E_{0l} + \frac{\alpha}{r^\nu} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right]} dr = \pi \hbar n; \quad n=0, \pm 1, \dots \quad (3)$$

Здесь произведены следующие переобозначения: $E_{n_r l}$ заменено на E_{nl} и $E_{\tilde{n}_r l}$ на E_{0l} , а также введено квантовое число $n = n_r - \tilde{n}_r$, характеризующее порядок расположения уровней по отношению к фиксированному уровню E_{0l} . Задание E_{0l} определяет весь спектр, при этом число уровней бесконечно, так как значения n не ограничены снизу и $E_{nl} \rightarrow -\infty$ при $n \rightarrow -\infty$ в соответствии с наличием «падения на центр».

Обсудим связь правила квантования (3) с ограничениями на волновые функции (1), ему соответствующими. Для этого заметим, что соотношение (3) следует из записи в.ф. в виде

$$\chi_{El} = \frac{C}{\sqrt{p_n(r)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_0^r p_n dr - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\tilde{b}} p_c dr - \frac{\pi}{4} \right) \approx \underset{r \rightarrow 0}{\approx} \tilde{C} r^{\nu/4} \sin \left[\frac{2\sqrt{\tilde{\alpha}}}{(\nu-2)r^{(\nu-2)/2}} + \tilde{\gamma}_l \right]. \quad (4)$$

Существеннейшим здесь является то обстоятельство, что значение фазы $\tilde{\gamma}_l$ не зависит от энергии. При этом волновые функции всех состояний (для данного l) при $r \rightarrow 0$ имеют одинаковую, не зависящую от энергии частицы радиальную зависимость, что обеспечивает обращение в нуль внеинтегрального слагаемого в соотношении

$$\int_0^\infty \chi_2^* \hat{H}_l \chi_1 dr = \int_0^\infty (\hat{H}_l \chi_2)^* \chi_1 dr - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\chi_2^* \chi_1' - \chi_2'^* \chi_1 \right] \Big|_{r=\varepsilon \rightarrow 0}^\infty$$

и означает, что задание ¹⁵⁾ $\tilde{\gamma}_l$ осуществляет самосопряженное расширение эрмитова оператора H (на состояниях с моментом l , сравнить с 1.29).

Проведенное исследование непосредственно переносится и на случай $\nu = 2$, если ввести поправку Лангера в центробежный потенциал. Воспользовавшись значением интеграла

$$\int \sqrt{\frac{c^2}{r^2} - a^2} dr = \sqrt{c^2 - a^2 r^2} - \frac{c}{2} \ln \frac{c + \sqrt{c^2 - a^2 r^2}}{c - \sqrt{c^2 - a^2 r^2}}, \quad (5)$$

приводим правило квантования (3) к виду

$$\alpha_l \ln \frac{E_{0l}}{E_{nl}} = 2\pi n, \quad \alpha_l = \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}.$$

Отсюда следует явное выражение для спектра

$$E_{nl} = E_{0l} \exp\left(-\frac{2\pi n}{\alpha_l}\right), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6)$$

Отметим, что число уровней бесконечно как за счет существования состояний со сколь угодно большой энергией связи ($n \rightarrow -\infty$), так и за счет сгущения уровней при $E = 0$ (для $n \rightarrow +\infty$); последнее отсутствует в случае $\nu > 2$. Приведем также выражение для в.ф. на малых расстояниях. Используя (5) и (6), согласно (4) находим

$$\chi_{E_{nl}}(r) \approx C_n \sqrt{r} \sin \left\{ \alpha_l \left[\frac{\alpha_{0l} r}{2\alpha_l} + 1 \right] - \frac{\pi}{4} \right\}.$$

Как и следует, зависимость фазы от энергии при $r \rightarrow 0$ отсутствует.

Заметим, наконец, что для потенциала $U = -\alpha/r^2$ у.Ш. допускает точное решение. При этом

$$\chi_{El} = C \sqrt{r} K_{i\alpha_l}(\alpha r),$$

где $K_\nu(z)$ — функция Макдональда, а точный спектр совпадает с квазиклассическим (6).

¹⁵⁾ Задание $\tilde{\gamma}_l$ эквивалентно фиксированию положения одного из уровней. Подчеркнем, что один и тот же параметр $\tilde{\gamma}_l$ определяет свойства состояний как дискретного спектра, при $E < 0$, так и непрерывного спектра, при $E > 0$. Заметим также, что если рассмотреть «плавное» обрезание потенциала при $r < r_0$ вида $U(r) = U(r_0)$ (вместо непроницаемой «стенки»), то для зависимости $\tilde{\gamma}_l$ от l можно получить соотношение $\tilde{\gamma}_l = \tilde{\gamma}_0 + \pi l/2$, сравнить с 9.7.

9.15. Рассмотрим сначала квазиклассические волновые функции вида бегущей волны

$$\Psi^{\pm} = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \pm \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' \right\},$$

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))} > 0.$$

Соответствующие им в.ф. в импульсном представлении имеют вид

$$\Phi_{(p)}^{\pm} = \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\pm \int_a^x p dx' - px \right] \right\} \frac{dx}{\sqrt{p(x)}} \quad (1)$$

(не путать p как переменную представления с $\pm p(x)$ — импульсом классической частицы!). Характерная особенность интеграла (1) для квазиклассических состояний в том, что фаза $\varphi(x)$ его экспоненциального сомножителя как функция x быстро изменяется и значение интеграла определяется в основном вкладом окрестностей стационарных точек показателя экспоненты. Обозначим положения этих точек как ¹⁶⁾ $x_s^{\pm}(p)$. Они определяются из условия

$$\frac{\partial \varphi^{\pm}}{\partial x} = 0, \quad \text{или} \quad \pm p(x_s^{\pm}) = p. \quad (2)$$

Разлагая $\varphi^{\pm}(x)$ в окрестности точек $x_s^{\pm}(p)$, имеем

$$\varphi^{\pm}(x) \approx \varphi^{\pm}(x_s^{\pm}) \pm \frac{m\omega(x_s^{\pm})}{2\hbar v(x_s^{\pm})} (x - x_s^{\pm})^2, \quad (3)$$

здесь $\omega = -U'/m$ и v — ускорение и скорость классической частицы в соответствующей точке x_s^{\pm} . Вынося теперь в (1) за знак интеграла медленно меняющийся множитель $p^{-1/2}(x)$ (т. е. заменяя его значением в стационарной точке) и вычисляя получающиеся интегралы с использованием разложения ¹⁷⁾ (3),

¹⁶⁾ Если их нет, то в рассматриваемом приближении $\Phi^{\pm}(p) = 0$. При этом в классически запрещенной области, где в.ф. $\Psi(x)$ экспоненциально убывает, можно считать $\Psi = 0$.

¹⁷⁾ Хотя интегрирование проводится по узким областям около точек x_s^{\pm} , ввиду быстрой сходимости его можно производить в бесконечных пределах; получающиеся интегралы — интегралы Пуассона.

находим

$$\Phi^{\pm}(p) \approx \sum_s \frac{C}{m \sqrt{\mp i \omega(x_s)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\pm \int_a^{x_s} p dx - p x_s \right] \right\}. \quad (4)$$

Подчеркнем, что вклад в сумму вносят все точки классической траектории частицы, в которых она имеет импульс p (при этом $\Phi^+ = 0$ для значений $p < 0$, а $\Phi^- = 0$ при $p > 0$).

Рассмотрим теперь в.ф. $\Psi_n(x)$ стационарного состояния в потенциале с одним минимумом, рис. 22. Записав синус в (IX.6) через экспоненты и используя (4), находим при $p > 0$:

$$\Phi_n(p) = \sqrt{\frac{-i}{mT(E_n)}} \left\{ \frac{\exp(i\varphi(x_1(p)))}{\sqrt{\omega(x_1(p))}} + \frac{\exp(i\varphi(x_2(p)))}{\sqrt{\omega(x_2(p))}} \right\}, \quad (5)$$

а $\Phi_n(p)$ для значений $p < 0$ получается комплексным сопряжением выражения (5), вычисленного при импульсе, равном $|p|$. Волновая функция (5) отлична от нуля лишь при значениях импульса

$$0 \leq p \leq p_0 = \sqrt{2m(E_n - \min U)}.$$

В ней учтено, что уравнение (2) при этом имеет два корня, расположенные по разные стороны от точки минимума потенциала $U(x)$, которые «сливаются» при $p \rightarrow p_0$ (в точке минимума $U(x)$, для больших значений p уравнение (2) уже не имеет корней).

Распределение по импульсам, $dW_n(p) = |\Phi_n(p)|^2 dp$, из-за наличия в (5) быстро осциллирующих экспонент также сильно осциллирует (сравнить с осцилляциями $|\Psi_n(x)|^2$). Однако если усреднить это распределение уже по небольшому интервалу импульсов, то интерференционный член пропадает и получается

$$\overline{dW}_n(p) = \left(\frac{1}{\omega(x_1(p))} + \frac{1}{\omega(x_2(p))} \right) \frac{dp}{mT(E_n)}, \quad -p_0 \leq p \leq p_0 \quad (6)$$

(здесь $\omega > 0$). Это выражение допускает простую классическую интерпретацию. Действительно, переходя в выражении $dW_{кл} = dt/T(E)$ от времени движения dt вдоль траектории к изменению при этом импульса частицы

$$dt = (dt/dp) dp = \pm dp/m\omega(p)$$

и учитывая двужначность зависимости $\omega(p)$ от p , приходим к распределению по импульсам классической частицы, совпадаю-

щему с выражением (6) (сравнить с классической вероятностью $dW_{\text{кл}} = 2dx/Tv(x)$ для координат частицы).

9.16. Основной вклад в искомую вероятность вносят области, непосредственно примыкающие к точкам остановки, где нарушается квазиклассичность. Рассмотрим точное решение у.Ш., основанное на линейной аппроксимации потенциала в окрестности этих точек. Вблизи правой точки поворота, $x = b$, у.Ш. принимает вид

$$\Psi''(x) - \frac{2m|F(b)|}{\hbar^2}(x-b)\Psi(x) = 0, \quad (1)$$

где $|F(b)| = U'(b)$, $E = U(b)$. Заменой переменной

$$z = (2m|F(b)|/\hbar^2)^{1/3}(x-b)$$

приводим (1) к виду $\Psi''(z) - z\Psi(z) = 0$. Решение этого уравнения, убывающее в глубь классически запрещенной области, выражается через функцию Эйри, т. е. $\Psi = c \text{Ai}(z)$. Ее асимптотики¹⁸⁾

$$\text{Ai}(z) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\pi^{1/2}z^{1/4}} e^{-\zeta}, & z \gg 1, \\ \frac{1}{\pi^{1/2}|z|^{1/4}} \sin\left(\zeta + \frac{\pi}{4}\right), & -z \gg 1, \end{cases} \quad (2)$$

где $\zeta = \frac{2}{3}|z|^{3/2}$. Теперь из сшивания решения с нормированной на единицу квазиклассической волновой функцией (IX.6) находим

$$c^2 = 2\pi(4m^2/|F|\hbar)^{1/3} T^{-1}(E_n)$$

и для вероятности нахождения частицы в классически запрещенной области справа от точки остановки $x = b$ получаем

$$w_1 = \int_b^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx \approx \frac{2\pi}{T(E_n)} \left(\frac{2m\hbar}{F^2(b)}\right)^{1/3} \int_0^{\infty} (\text{Ai}(z))^2 dz.$$

Используя связь функции Эйри с функцией Макдональда: $\text{Ai}(z) = \sqrt{z/3\pi^2} K_{1/3}(\zeta)$, где $\zeta = \frac{2}{3}|z|^{3/2}$, и известное значение

¹⁸⁾ Так как при этом $\zeta = \frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x p(x) dx \right|$, то из (2) следуют

приведенные в (IX.3,4) условия сшивания квазиклассических решений (область $|\zeta| \gg 1$ — уже область квазиклассичности).

интеграла $\int_0^{\infty} z^{-\nu} K_{\nu}^2(z) dz$ (см. [33, с. 707]), находим искомую

вероятность

$$w = w_1 + w_2 = \frac{3^{1/3} \Gamma^2(2/3)}{2\pi T(E_n)} \left[\left(\frac{2m\hbar}{F^2(a)} \right)^{1/3} + \left(\frac{2m\hbar}{F^2(b)} \right)^{1/3} \right], \quad (3)$$

где для потенциала приведенного на рис. 22 вида учтены обе классически запрещенные области; $\Gamma(z)$ — гамма-функция, при этом $\Gamma(2/3) \approx 1,354$.

Для осциллятора $U = m\omega^2 x^2/2$, $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ имеем

$$F^2(a) = F^2(b) = 2m\hbar\omega^3(n + 1/2)$$

и согласно (3) получаем

$$w_n \approx 0,134(n + 1/2)^{-1/3}. \quad (4)$$

Как и обычно, квазиклассический результат имеет достаточно высокую точность и для значений $n \sim 1$. Так, для основного и первого возбужденного состояний осциллятора из формулы (4) следует $w_0 \approx 0,169$ и $w_1 \approx 0,117$, в то время как точные значения этих вероятностей равны 0,157 и 0,112 соответственно.

9.17. В приближении (IX.6) для волновой функции получаем

$$F_{nn} = \frac{2}{T(E_n)} \int_a^b \frac{F(x) dx}{v(x)} = \frac{\sqrt{2m}}{T(E_n)} \int_a^b \frac{F(x) dx}{\sqrt{E_n - U(x)}}, \quad (1)$$

так что квантовомеханическое среднее совпадает со средним значением за период движения в классической механике.

Для линейного осциллятора, $U = m\omega^2 x^2/2$, по формуле (1) получаем

$$\overline{x^2} = a^2 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \overline{x^4} = \frac{3}{2} a^4 \left(n^2 + n + \frac{1}{4} \right), \quad (2)$$

где $a^2 = \hbar/m\omega$ (для вычисления интегралов удобно сделать подстановку $x = \sqrt{2E_n/m\omega^2} \sin \varphi$). Значение $\overline{x^2}$ совпадает с точным; отличие квазиклассического среднего $\overline{x^4}$ от точного только в том, что в последнем вместо слагаемого $1/4$ (в скобках) фигурирует $1/2$. Эти результаты согласуются с квазиклассической точностью выражения (1), обеспечивающей правильные значения первых двух членов разложения по параметру $1/n$ рассматриваемой физической величины; сравнить с 9.10 и 9.13.

9.18. Воспользуемся для волновой функции приближением (IX.6) и выразим синус через экспоненты. Теперь заметим, что

$$\begin{aligned}
 p^k \frac{1}{\sqrt{\rho(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx \right) &\approx \\
 &\approx \frac{1}{2i \sqrt{\rho(x)}} \left[p^k(x) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx \right) - \right. \\
 &\quad \left. - (-p(x))^k \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx \right) \right], \quad (1)
 \end{aligned}$$

так как ввиду квазиклассичности следует дифференцировать лишь экспоненциальные множители как наиболее быстро изменяющиеся. Аналогичным (1) выражением, с заменой в правой части $(\pm p(x))^k$ на $F(\pm p(x))$, описывается результат действия на в.ф. оператора $\hat{F} \equiv F(p)$. Теперь вычисление среднего F_{nn} сводится к вычислению четырех интегралов. Два из них содержат быстро осциллирующие множители, $\propto \exp \left[\pm \frac{2i}{\hbar} \int p dx \right]$, поэтому они малы и могут быть опущены. В результате получаем

$$F_{nn} = \frac{2}{T(E_n)} \int_a^b \frac{F(p(x)) - F(-p(x))}{v(x)} dx = \frac{1}{T(E_n)} \oint \frac{F(p(x)) dx}{v(x)}, \quad (2)$$

что совпадает со средним за период движения значением рассматриваемой величины в классической механике¹⁹⁾.

Для осциллятора согласно (2) находим

$$\overline{p^2} = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \overline{p^4} = \frac{3}{2} (m\hbar\omega)^2 \left(n^2 + n + \frac{1}{4} \right). \quad (3)$$

Значение $\overline{p^2}$ совпадает с точным, а $\overline{p^4}$ отличается от точного лишь значением поправки на фоне $n^2 + n$: в точном результате она равна 1/2 вместо 1/4; см. замечание в предыдущей задаче по поводу точности квазиклассического приближения при вычислении средних.

9.19. Искомая оценка следует из правила квантования (IX.5). Имея в виду, что интеграл в нем по порядку величины

¹⁹⁾ Его можно записать также в виде $F_{nn} = \int F(p) dW_n(p)$,

где распределение вероятностей для импульса определяется результатом из 9.15.

равен $(b - a) p_{\text{хар}}$, где $p_{\text{хар}}$ — характеристическая величина импульса частицы, и учитывая, что $\Delta x \sim (b - a)/2$, а $\Delta p \sim p_{\text{хар}}$ (так как $\bar{p} = 0$), получаем

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \frac{\pi}{2} \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

(мы сохранили здесь $1/2$ на фоне n , чтобы использовать эту оценку и при $n \sim 1$, в том числе и при $n = 0$). Точное квантовомеханическое значение²⁰ $\sqrt{(\Delta x)^2 \cdot (\Delta p)^2}$ для осциллятора равно $\hbar(n + 1/2)$ (для всех n), а для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме $\pi \hbar n / 2 \sqrt{3}$ при $n \gg 1$.

9.20. Доминирующий вклад в значение матричного элемента вносит область интегрирования между точками поворота и при его вычислении можно воспользоваться выражением (IX.6) для в. ф. Ввиду предполагаемой близости состояний n и m значения точек поворота и частоты движения для них можно считать одинаковыми и получить при этом

$$F_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{F} \Psi_n dx \approx \frac{\omega}{\pi} \int_a^b \frac{F(x)}{v(x)} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x (p_m - p_n) dx' \right] dx - \\ - \frac{\omega}{\pi} \int_a^b \frac{F(x)}{v(x)} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x (p_m + p_n) dx' \right] dx. \quad (1)$$

Подынтегральная функция во втором слагаемом быстро осциллирует (ввиду $m, n \gg 1$), так что его значение пренебрежимо мало. Учитывая, что в квазиклассическом приближении разность энергий соседних уровней равна $\hbar\omega$, находим

$$p_m(x) - p_n(x) \approx \hbar\omega(m - n)/v(x),$$

после чего получаем

$$F_{mn} \approx \frac{\omega}{\pi} \int_a^b \frac{F(x)}{v(x)} \cos \left[\omega(m - n) \int_a^x \frac{dx'}{v(x')} \right] dx. \quad (2)$$

Имея в виду зависимость от времени координаты классической частицы $x = x(t)$, которая движется с энергией²¹

²⁰) Заметим, что $\sqrt{(\Delta f)^2} \geq |\overline{\Delta f}|$.

²¹) Физически естественное использование такого «усредненного» значения энергии классической частицы обеспечивает выполнение условия эрмитовости, $F_{mn} = F_{nm}$.

$E = (E_m + E_n)/2$, сделаем в (2) подстановку $t = t(x)$, что дает

$$F_{mn} = \frac{2}{T} \int_0^{T/2} F(x(t)) \cos[\omega(m-n)t] dt,$$

или

$$F_{mn} = \frac{1}{T} \int_0^T F(x(t)) e^{-i\omega(m-n)t} dt = \tilde{F}_{s=m-n} \quad (3)$$

(начальный момент времени выбран так, что $x(0) = a$; изменению t от 0 до $T(E) = 2\pi/\omega$ соответствует изменение x от a до b и обратно).

Формула (3) устанавливает искомое соотношение между квантовомеханическими матричными элементами и фурье-компонентами в классической механике.

Проиллюстрируем точность соотношения (3) на примере координаты линейного осциллятора. Для него $x(t) = A \cos \omega t$, так что согласно (3) отличны от нуля только фурье-компоненты $\tilde{x}_1 = \tilde{x}_{-1} = A/2$. Так как энергия классического осциллятора равна $E = m\omega^2 A^2/2$, то приравняв ее $(E_n + E_m)/2$ и учтя, что $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, находим A^2 и отличные от нуля матричные элементы координаты осциллятора в квазиклассическом приближении

$$x_{n+1, n} = x_{n, n+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (n + 1),$$

что совпадает с точным результатом. Аналогично для квадрата координаты, $x^2(t) = A^2 \cos^2(\omega t)$, находим, что отличны от нуля лишь следующие фурье-компоненты: $(\tilde{x}^2)_0 = 2(\tilde{x}^2)_2 = 2(\tilde{x}^2)_{-2} = A^2/2$. Используя отмеченную выше связь A^2 с $E_{m, n}$ (значения A^2 для случаев $m = n$ и $m \neq n$ — различные!), находим согласно (3) отличные от нуля квазиклассические матричные элементы

$$(x^2)_{nn} = a^2 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (x^2)_{n, n+2} = (x^2)_{n+2, n} = \frac{1}{2} a^2 \left(n + \frac{3}{2} \right), \quad (4)$$

где $a^2 = \hbar/2m\omega$. Точное значение $(x^2)_{nn}$ совпадает с (4), а для $(x^2)_{n, n+2}$ оно отличается от (4) заменой $n + 3/2$ на $[(n + 1)(n + 2)]^{1/2}$. Как видно, квазиклассика обеспечивает достаточно высокую точность и для квантовых чисел $n, m \sim 1$.

9.21. Задача решается аналогично предыдущей. Теперь следует учесть, что при действии оператора \hat{p} на квазиклассическую функцию достаточно дифференцировать лишь по перемен-

ной x в аргументе синуса (сравнить с 9.18). После простых преобразований получаем

$$(\rho^k)_{mn} = \frac{2}{T} \int_0^{T/2} dt \rho^k(t) \cdot \begin{cases} \cos [\omega(m-n)t], & k - \text{четное,} \\ -i \sin [\omega(m-n)t], & k - \text{нечетное.} \end{cases} \quad (1)$$

Так как знаки импульса частицы при $0 < t < T/2$ и $T/2 < t < T$ противоположны, то оба выражения (1) можно объединить в одно:

$$(\rho^k)_{mn} = \frac{1}{T} \int_0^T \rho^k(t) e^{-i\omega(m-n)t} dt \equiv (\widetilde{\rho^k}(t))_{s=m-n}. \quad (2)$$

Очевидно, что аналогичное соотношение $F_{mn} = \widetilde{F}_{s=m-n}$ между квантовомеханическими матричными элементами и классическими фурье-компонентами имеет место и для произвольной физической величины²²⁾ $F(p)$, сравнить с соотношением (3) из 9.20.

Матричные элементы ρ_{mn} и $(\rho^2)_{mn}$ для импульса осциллятора вычисляются так же, как и в предыдущей задаче для координаты и описываются, по существу, такими же выражениями с заменой $\hbar/m\omega$ на $\hbar m\omega$ (при этом в них появляются еще незначительные фазовые множители). Такая аналогия не случайна: она отражает в квазиклассическом приближении то обстоятельство, что у.Ш. и в.ф. для осциллятора в координатном и импульсном представлениях имеют одинаковый вид.

9.22. Ввиду мгновенности изменения потенциала, в.ф. сразу после включения $V(x)$ совпадает с $\Psi_{i,n}$ (здесь и ниже индексы i и f относятся к стационарным состояниям частицы в потенциалах $U(x)$ и $U(x) + V(x)$, но если это не может привести к недоразумениям, то мы их опускаем). При этом для искомого среднего легко получаем (при $t > 0$):

$$\overline{E} = E_n + \overline{V(x)}, \quad \overline{(\Delta E)^2} = \overline{V^2(x)} - \overline{V(x)}^2 \quad (1)$$

(после включения $V(x)$ гамильтониан опять не зависит от времени, энергия сохраняется, а энергетические характеристики состояния остаются неизменными). В общем случае квантовомеханическое усреднение в (1) проводится по состоянию с в.ф. $\Psi_n(x)$, но в квазиклассическом приближении оно может быть заменено более простым усреднением по периоду финитного движения классической частицы с энергией E_n в потенциале $U(x)$ (см. по этому поводу 9.17).

²²⁾ Оно справедливо в квазиклассическом приближении для произвольной физической величины $F(x, p)$.

Вероятность перехода при внезапном изменении потенциальной энергии (см. 8.47)

$$\omega(n \rightarrow k) = \left| \int \Psi_{f, k}^*(x) \Psi_{i, n}(x) dx \right|^2. \quad (2)$$

Воспользовавшись здесь для волновых функций выражениями вида (IX.6) (для указанных выше потенциалов), преобразуем матричный элемент следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle k, f | n, i \rangle = & \\ = & \frac{m}{\sqrt{T_f(E_k) T_i(E_n)}} \int_a^b \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\int_{a_f}^x p_k dx' - \int_{a_i}^x p_n dx' \right) \right] - \right. \\ & \left. - \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\int_{a_f}^x p_k dx' + \int_{a_i}^x p_n dx' \right) + i \frac{\pi}{2} \right] + \text{к. с.} \right\} \times \\ & \times \frac{dx}{\sqrt{p_k(x) p_n(x)}}, \quad (3) \end{aligned}$$

где к. с. означает комплексно сопряженное выражение по отношению к выписанному в фигурных скобках, $a = \max(a_i, a_f)$, $b = \min(b_i, b_f)$; $a_{i, f}$ и $b_{i, f}$ — точки остановки в квазиклассических состояниях $\Psi_{i, n}$, $\Psi_{f, k}$.

Характерная особенность интегралов в (3) — большое и быстро изменяющееся значение фаз экспонент. Такие интегралы существенно отличны от нуля в случае, когда у фазы как функции x имеются стационарные точки, интегрирование в окрестностях которых и вносит доминирующий вклад в его значение. У второй экспоненты в (3) и ей комплексно сопряженной, очевидно, таких точек нет (по определению $p_{n, k} > 0$) и эти слагаемые могут быть опущены. Для первой экспоненты условие стационарности фазы, $\partial\varphi/\partial x = 0$, принимает вид²³⁾ $p_{f, k}(x_s) = p_{i, n}(x_s)$, т. е.

$$\begin{aligned} \sqrt{E_{i, n} - U(x_s)} &= \sqrt{E_{f, k} - U(x_s) - V(x_s)}, \\ \text{или } E_{f, k} &= E_{i, n} + V(x_s). \quad (4) \end{aligned}$$

²³⁾ Число стационарных точек x_s зависит как от вида потенциалов, так и значений $E_{n, k}$. Если $V(x)$ — монотонная функция x , то их либо одна, либо вообще нет; в случае, когда $U(x)$ и $V(x)$ — симметричные функции (с одним минимумом), таких точек две или ни одной. Отсутствие стационарных точек означает, что вероятность соответствующего перехода в рассматриваемом приближении пренебрежимо мала.

Отсюда видно, что энергетический интервал разрешенных переходов ограничен условиями

$$V_{\min} < E_{f, k} - E_{i, n} < V_{\max},$$

где $V_{\max(\min)}$ — максимальное (минимальное) значение $V(x)$ на интервале движения $a_i < x < b_i$ классической частицы в исходном состоянии. Отметим, что условие (4) имеет наглядный физический смысл. Так как в результате мгновенного изменения потенциала импульс классической частицы не изменяется, то оно определяет такие точки траекторий в фазовом пространстве (p, x) , которые являются общими для начального и конечного состояний.

Для вычисления интеграла разложим фазу экспоненты в окрестности стационарной точки

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \left(\int_{a_i}^x p_k dx - \int_{a_i}^x p_n dx \right) &\approx \varphi_k(x_s) + \\ &+ \frac{1}{2\hbar} \left(\frac{F_f(x_s)}{v_k(x_s)} - \frac{F_i(x_s)}{v_n(x_s)} \right) (x - x_s)^2 = \\ &= \varphi_k(x_s) - \frac{mV'(x_s)}{2\hbar p_n(x_s)} (x - x_s)^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Теперь заметим, что ввиду предполагаемого условия $|V'(b-a)| \gg \hbar\omega_n$ область значений $(x - x_s)$, в которой изменение фазы порядка единицы и которая вносит основной вклад в интеграл, мала по сравнению с характерной областью движения частицы, $\sim (b-a)$. Соответственно в (5) можно ограничиться квадратичным членом разложения, распространить интегрирование в окрестности каждой стационарной точки x_s на всю область (из-за быстрой сходимости возникающих интегралов) и получить

$$\int \Psi_{f, k}^* \Psi_{i, n} dx = \sqrt{\frac{2\pi m \hbar}{T_i T_f}} \sum_s \left\{ \frac{\exp(i\varphi_k(x_s))}{\sqrt{iV'(x_s) p_n(x_s)}} + \text{к. с.} \right\}. \quad (6)$$

Из-за большой величины фаз $\varphi_k(x_s)$ в (6) значения вероятностей (2), как и само значение матричного элемента (6), испытывают сильные осцилляции уже при небольшом изменении номера k конечного состояния. Однако после усреднения по небольшому интервалу конечных состояний такие осцилляции

исчезают и получается следующее выражение ²⁴⁾:

$$\bar{\omega}(n \rightarrow k) = \frac{4\pi m \hbar}{T_i(E_n) T_f(E_k)} \sum_s \frac{1}{p_{i,n}(x_s) |V'(x_s)|}. \quad (7)$$

Найдем теперь вероятность возбуждения конечных состояний k , относящихся к некоторому энергетическому интервалу dE_f . Так как расстояние между соседними уровнями в квазиклассическом приближении равно $\Delta E_k = \hbar \omega_f(E_k)$, то искомая вероятность получается умножением (7) на $dk = dE_f / \Delta E_k$ — число состояний в этом интервале — и описывается выражением

$$d\omega_f = \frac{2m}{T_i(E_n)} \sum_s \frac{dE_f}{p_{i,n}(x_s) |V'(x_s)|}. \quad (8)$$

В эту формулу уже не входит постоянная Планка и она допускает наглядную интерпретацию в рамках классической механики. Для этого заметим, что энергия классической частицы при внезапном включении $V(x)$ зависит от точки x нахождения ее в этот момент времени и равна $E_f = E_i + V(x)$. Соответственно распределение вероятностей для E_f определяется распределением по координатам частицы в исходном состоянии, которое имеет вид

$$d\omega = 2 dx / T(E_i) v_i(x).$$

Переходя теперь от переменной x к энергии E_f и учитывая, вообще говоря, многозначный характер зависимости x от E_f , приходим к формуле (8), что, кстати, подтверждает нормировку на единицу этого распределения, а тем самым и распределения вероятностей (7).

Если при энергии частицы $E \geq E_0$ движение ее в потенциале $U(x) + V(x)$ является уже инфинитным, то формула (8) при $E_f > E_0$ определяет распределение по энергиям частицы, покидающей яму, а интегрирование по энергии E_f в пределах от E_0 до $E_{\max} = E_{i,n} + \max V$ дает вероятность вылета частицы («ионизации» системы) при внезапном изменении потенциала ²⁵⁾.

²⁴⁾ Читателю предлагается обсудить вопрос об особенностях интерференции вклада симметричных стационарных точек в случае, когда $U(x)$ и $V(x)$ являются симметричными потенциалами; отметим лишь, что при этом переходы происходят между состояниями n и k одинаковой четности и $\bar{\omega}$ для таких переходов отличается от (7) множителем, равным 2, для других переходов $\omega(n \rightarrow k) = 0$.

²⁵⁾ Это обстоятельство представляется очевидным, если иметь в виду отмеченную аналогию с классической механикой. При квантовомеханическом рассмотрении следует учесть изменение вида в. ф. $\Psi_{f,k}$, которая при $E_k > E_0$ описывает уже состояния непрерывного спектра.

В приложении полученных результатов к осциллятору имеем

$$E_{i, n} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad E_{f, k} = \hbar\omega \left(k + \frac{1}{2} \right) - \frac{F_0^2}{2m\omega^2}.$$

Согласно (4) находим

$$x_s = [\hbar\omega (n - k) + F_0^2/2m\omega^2]/F_0,$$

после чего по формуле (7) получаем вероятности переходов²⁶⁾

$$\bar{w}(n \rightarrow k) = \left(\frac{m\hbar\omega^3}{2\pi^2 F_0^2 (n + 1/2)} \right)^{1/2} \times \\ \times \left\{ 1 - \frac{m\omega}{2\hbar F_0^2 (n + 1/2)} \left[\hbar\omega (n - k) + \frac{F_0^2}{2m\omega^2} \right] \right\}^{-1/2}$$

(они отличны от нуля лишь для таких значений k , при которых выражение под радикалом положительно). Формула (8) при этом может быть записана более наглядным образом:

$$d\omega_f = \frac{dE_f}{\pi [(E_f - E_{f, \min})(E_{f, \max} - E_f)]^{1/2}},$$

где $E_{f, \max(\min)} = E_{i, n} \pm a_n F_0$ — максимальная (минимальная) энергия, которую может иметь в условиях рассматриваемой задачи осциллятор при $t > 0$, здесь $a_n = \sqrt{2\hbar(n + 1/2)/m\omega}$ — амплитуда колебаний классического осциллятора при $t < 0$.

9.23. По формуле (IX.7) получаем следующие результаты.

$$a) \quad D(E) = \exp \left\{ -\frac{8\sqrt{2m|E|^3}}{3\hbar F_0} \right\}, \quad (1)$$

что при большой величине показателя экспоненты, когда $D \ll 1$, совпадает с точным результатом для проникаемости треугольного барьера, см. 2.36.

б) В случае потенциала $U = U_0 \operatorname{ch}^{-2}(x/a)$, используя для вычисления интеграла подстановку

$$\operatorname{sh}(x/a) = \varkappa \sin t, \quad \varkappa = \sqrt{U_0/E - 1},$$

находим проникаемость барьера в квазиклассическом приближении

$$D(E) = \exp \left[-2\pi \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}} (\sqrt{U_0} - \sqrt{E}) \right], \quad (2)$$

²⁶⁾ Заметим, что $\bar{w}(n \rightarrow k) = \bar{w}(k \rightarrow n)$.

в то время как точное выражение (см. [1, § 25])

$$D(E) = \frac{\text{sh}^2(\pi ka)}{\text{sh}^2(\pi ka) + \text{ch}^2(\pi \sqrt{2mU_0 a^2/\hbar^2 - 1/4})}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Как видно, при выполнении условий

$$2\pi \sqrt{2ma^2/\hbar^2} (\sqrt{U_0} - \sqrt{E}) \gg 1, \quad E \gg \hbar^2/ma^2 \quad (3)$$

квазиклассический результат великолепно воспроизводит точный. Первое из условий (3), обеспечивающее значение $D \ll 1$, — обычное для применимости квазиклассического выражения для проницаемости барьера. По поводу второго необходимо сделать следующее замечание. Его происхождение связано с тем обстоятельством, что в основе вывода формулы (IX.7) лежат условия сшивания квазиклассических решений в окрестностях точек остановки классического движения, основанные на линейной аппроксимации потенциала. Однако в задачах, подобных данной (когда на больших расстояниях $U \rightarrow 0$), при малых энергиях частицы использование таких условий не оправдано²⁷⁾. Это особенно наглядно видно из рассмотрения случая $E = 0$, когда на больших расстояниях квазиклассика вообще неприменима, сравнить с 9.8 и 9.9. Изменение условий сшивания решений приводит к модификации квазиклассической формулы (IX.7), сводящейся к появлению дополнительного предэкспоненциального множителя, имеющего величину порядка единицы²⁸⁾.

Для данной задачи он, как видно из сравнения приведенных выражений для $D(E)$, равен $4 \text{sh}^2(\pi ka) e^{-2\pi ka}$ и особенно существен при $E \rightarrow 0$, так как при этом он $\propto E$ (а с увеличением энергии, как и следует, обращается в единицу).

в) Для указанного потенциала

$$D(E) \sim \exp \left[-\frac{4a \sqrt{2m}}{3\hbar U_0} (U_0 - E)^{3/2} \right]. \quad (4)$$

Это выражение определяет коэффициент прохождения лишь по порядку величины, но передает главное: его экспоненциальную малость. В точном выражении имеется дополнительный предэкспоненциальный множитель, равный $4 \sqrt{E(U_0 - E)}/U_0$. Его появление отражает изменение условий сшивания квазиклассических решений в окрестности точки поворота $x = 0$ (которая

²⁷⁾ Исключая случай медленно убывающих, $U \propto |x|^{-\nu}$ с $\nu < 2$, при $x \rightarrow \pm\infty$ потенциалов.

²⁸⁾ Сравнить с аналогичным изменением фазы квазиклассической волновой функции при рассмотрении связанных состояний, приводящим к модификации правила квантования Бора — Зоммерфельда в задачах § 1.

уже не является точкой остановки!) по сравнению с теми, которые приводят к (IX.7), сравнить с проницаемостью барьера из б) при $E \rightarrow 0$.

В заключение отметим, что вопросы вычисления предэкспоненциального множителя в квазиклассических выражениях для проницаемостей барьеров, когда неприменимы условия сшивания квазиклассических решений уравнения Шрёдингера, основанные на линейной аппроксимации потенциала в точках поворота, обсуждаются в задачах 9.24—9.26.

9.24. Поступая так же, как и при выводе квазиклассической формулы (IX.7) для проницаемости барьера, см. [1, § 50], и считая, что падающие на барьер частицы движутся слева направо, запишем волновую функцию при $x > b$ в виде

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx + \frac{i\pi}{4}\right). \quad (1)$$

При этом в. ф. в области барьера

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b |p(x)| dx\right), \quad 0 \leq x < b \quad (2)$$

(здесь пренебрежено затухающим в глубь барьера слагаемым). Существенно, что в условиях задачи это решение применимо, вообще говоря, непосредственно вплоть до точки²⁹⁾ $x = 0$, в которой потенциал испытывает скачок. Волновая функция при $x \leq 0$ имеет вид

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx\right) + A \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx\right) \right], \quad (3)$$

при такой нормировке коэффициент прохождения барьера $D = |C|^2$.

Сшивая выражения (2) и (3) в точке $x = 0$ (используя непрерывность в. ф. и ее производной, причем ввиду квазиклассичности достаточно дифференцировать лишь экспоненциальные множители как наиболее быстро изменяющиеся), получаем

$$\begin{aligned} (1 + A) p_1^{-1/2}(0) &= C (D_0(E) |p_2(0)|)^{-1/2}, \\ (1 - A) p_1^{1/2}(0) &= iC |p_2(0)|^{1/2} D_0^{-1/2}(E), \end{aligned}$$

²⁹⁾ При этом E не должно быть слишком близким к U_2 и U_1 (чтобы в окрестности точки $x = 0$ не нарушалось условие квазиклассичности), но если $U(x) = U_1 = \text{const}$ при $x < 0$, то второе ограничение отсутствует.

$$p_1(0) = \sqrt{2m(E - U_1)}, \quad |p_2(0)| = \sqrt{2m(U_2 - E)},$$

а $D_0(E)$ определяется обычным квазиклассическим выражением (IX.7) для проницаемости барьера. Отсюда легко находим значение C , а с ним и коэффициент прозрачности барьера:

$$D(E) = \frac{4\sqrt{(E - U_1)(U_2 - E)}}{U_2 - U_1} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^b |p(x)| dx\right). \quad (4)$$

Появление здесь предэкспоненциального множителя (величина которого порядка единицы) по сравнению с (IX.7) связано с изменением условий сшивания квазиклассических решений в окрестности точки поворота $x = 0$.

Применительно к потенциалу из 2.35 имеем $U_2 = U_0$, $U_1 = 0$ и предэкспоненциальный множитель оказывается равным $4\sqrt{E(U_0 - E)}/U_0$. При этом (4) совпадает с точным результатом (естественно, при большой величине показателя экспоненты, когда $D \ll 1$, сравнить с 9.23в).

9.25. Задачу можно было бы решить так же, как и предыдущую, учитывая, что теперь условия сшивания квазиклассических решений, основанные на линейной аппроксимации потенциала, изменяются в обеих точках поворота a , b . Однако окончательный результат представляется очевидным и без вычислений. Для этого заметим, что модификация квазиклассической формулы (IX.7), связанная с изменением условий сшивания волновой функции, используемых при ее выводе, сводится к появлению дополнительного предэкспоненциального множителя $\alpha(E)$, зависящего от характера нарушения условий квазиклассичности в окрестности точек поворота. Важным свойством этой зависимости является ее *факторизованный* вид:

$$\alpha(E) = \alpha_1(E) \cdot \alpha_2(E), \quad (1)$$

где не зависящие друг от друга множители $\alpha_{1,2}(E)$ связаны с каждой из точек поворота (на первый взгляд такое соотношение неочевидно из-за различного вида решений, сшиваемых в левой и правой точках поворота; однако если учесть независимость коэффициента прохождения при данной энергии от направления падения частиц на барьер, то оно представляется уже естественным, сравнить с 9.26). В условиях сшивания решения, основанного на линейной аппроксимации потенциала и приводящего к формуле (IX.7), имеем $\alpha_{1,2} = 1$, а в условиях предыдущей задачи

$$\alpha_1 = \frac{4\sqrt{(E - U_1)(U_2 - E)}}{U_2 - U_1}, \quad \alpha_2 = 1. \quad (2)$$

Согласно (1) для данной задачи α_1 описывается выражением (2), а $\alpha_2(E)$ отличается от $\alpha_1(E)$ лишь заменами U_1 на U_3 и U_2 на U_4 . Это замечание решает вопрос о вычислении про-ницаемости барьера:

$$D(E) = \alpha_1(E) \alpha_2(E) D_0(E),$$

где $D_0(E)$ описывается (IX.7). Отсюда для прямоугольного барьера высоты U_0 и ширины a получаем

$$D(E) = 16 \frac{E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)a^2}\right) \quad (3)$$

при $m(U_0 - E)a^2/\hbar^2 \gg 1$; сравнить с точным результатом для про-ницаемости барьера из 2.31.

9.26. Формула (IX.7) при $E \rightarrow 0$ неприменима³⁰⁾. Согласно ей $D(E=0) \neq 0$, в то время как точный результат дает $D(E) \approx \approx bE \rightarrow 0$. Для вычисления коэффициента b в этой зависимости согласно 2.39 надо найти решение у.Ш. с $E=0$, удовлетворяющее граничному условию $\Psi(x) \rightarrow 1$ при $x \rightarrow +\infty$. Так как в случае $E=0$ квазиклассичность на больших расстояниях нарушается, то в этих областях следует воспользоваться точным решением у.Ш., а затем сшить его с квазиклассическим решением на конечных расстояниях (где точное решение уже не может быть получено, но применима квазиклассика; сравнить с аналогичным подходом при решении задач 9.8 и 9.9).

У. Ш. на больших расстояниях, где $U(x) \approx U_{1,2}(a/|x|)^{\nu_{1,2}}$, принимает вид

$$\Psi'' - \frac{\alpha}{|x|^\nu} \Psi = 0, \quad \alpha = \frac{2mUa^\nu}{\hbar^2}.$$

Решения этого уравнения выражаются через цилиндрические функции (см., например, [33])

$$\sqrt{|x|} Z_s(2i\sqrt{\alpha}s|x|^{1/2s}), \quad s = \frac{1}{2-\nu}.$$

С учетом граничного условия $\Psi(+\infty) = 1$, решение у.Ш. на больших расстояниях справа следует выбрать в виде

$$\Psi = C \sqrt{x} J_{-s_1}(2i\sqrt{\alpha_1}s_1x^{1/2s_1}), \quad C = (i\sqrt{\alpha_1}s_1)^{s_1} \Gamma(1-s_1), \quad (1)$$

³⁰⁾ Сравнить с 9.236).

где $\Gamma(z)$ — гамма-функция. На расстояниях $x \ll \alpha_1^{-s_1}$, воспользовавшись асимптотикой функций Бесселя

$$J_\nu(z) \approx \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} \sin\left(z - \frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{4}\right), \quad z \rightarrow \infty,$$

получаем

$$\Psi(x) \approx C i^{s_1} \left(\frac{\nu_1 - 2}{4\pi \sqrt{\alpha_1}}\right)^{1/2} x^{\nu_1/4} \exp\left(\frac{2\sqrt{\alpha_1}}{\nu_1 - 2} x^{1/2 s_1}\right) \quad (2)$$

(здесь учтено, что аргумент функции Бесселя в (1) — чисто мнимый, а $\nu > 2$; при этом экспоненциально убывающее с уменьшением x слагаемое в (2) опущено). Это решение имеет уже квазиклассический вид, что определяет в. ф. $\Psi(x)$ во всей области квазиклассичности на конечных расстояниях (где потенциал, конечно, не описывается своей асимптотикой):

$$\begin{aligned} \Psi &\approx \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^\infty |p| dx\right) \equiv \\ &\equiv \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^x |p| dx\right), \end{aligned} \quad (3)$$

здесь

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{-2mU(x)}, \quad C_1 = C_2 \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^\infty |p| dx\right) = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{\pi}} (\nu_1 - 2)^{\nu_1/2} (\nu_1 - 2) \alpha_1^{-1/2} (\nu_1 - 2) \Gamma(1 - s_1). \end{aligned} \quad (4)$$

Теперь заметим, что решение у.Ш. на больших расстояниях слева (т. е. при $x \rightarrow -\infty$) должно быть выбрано в виде

$$\Psi(x) = \tilde{C} \sqrt{-x} H_{-s_2}^{(2)}(2i \sqrt{\alpha_2} s_2 (-x)^{1/2} s_2), \quad (5)$$

где $H_\nu^{(2)}(z)$ — функция Ганкеля, так как именно оно при значениях $|x| \ll \alpha_2^{-s_2}$ в квазиклассической области переходит в экспоненциально убывающее в глубь барьера решение (3). Воспользовавшись асимптотикой $H_\nu^{(2)}(z)$ при $z \rightarrow \infty$, получаем

$$\tilde{C} = -i \sqrt{\frac{\pi}{(\nu_2 - 2)\hbar}} \exp\left(\frac{i}{2} \pi s_2\right) C_2. \quad (6)$$

Теперь, используя связь функций Ганкеля и Бесселя, находим асимптотику решения (5) при $x \rightarrow -\infty$ (при этом аргумент

функции Ганкеля стремится к нулю). Она, как и следует, имеет вид $\Psi \approx -Bx$, причем, с учетом выражений (4) и (6), коэффициент B оказывается равным

$$B = \left\{ \beta_1 \beta_2 \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} |p| dx \right) \right\}^{-1},$$

где значения $\beta_{1,2}$ определяются выражением

$$\beta = \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1-s)} [\alpha(\nu-2)^{-\nu}]^{1/2(\nu-2)} \quad (7)$$

(индексы 1, 2 для краткости записи опущены).

Наконец, воспользовавшись результатом 2.39, приходим к искомому выражению для коэффициента прохождения медленных частиц, которое можно записать в виде

$$D(E) = \gamma_1(E) \gamma_2(E) \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{2mU(x)} dx \right) \propto E, \quad (8)$$

где

$$\gamma_{1,2}(E) = 2k\beta_{1,2}^2. \quad (9)$$

Установленный характер модификации квазиклассической формулы (IX.7): появление дополнительного предэкспоненциального множителя $\gamma(E)$ и его факторизованный вид

$$\gamma(E) = \gamma_1(E) \cdot \gamma_2(E)$$

отражают общую закономерность, отмеченную в предыдущей задаче.

Аналогичным образом можно было бы рассмотреть случай потенциала с экспоненциальным убыванием, $U \propto e^{-|x|/R}$, на больших расстояниях (о точном решении при этом у.Ш. см., например, 4.8б)). Однако если иметь в виду 9.23б), то окончательный результат представляется очевидным и без вычислений: в этом случае

$$\gamma_{1,2} = 2 \operatorname{sh}(2\pi k R_{1,2}) \exp(-2\pi k R_{1,2}) \quad (10)$$

и для медленных частиц

$$\gamma_{1,2} \approx 4\pi k R_{1,2}. \quad (11)$$

Поучительно получить последнее соотношение из выражений (7), (9), рассматривая экспоненциальный потенциал как предельный переход при $\nu \rightarrow \infty$ степенного потенциала. Для этого введем сначала $x_0 = \nu R$ и рассмотрим значения x , близкие к x_0 .

При этом

$$\left(\frac{x_0}{x}\right)^{\nu} \equiv \left(\frac{x_0}{x_0 + (x - x_0)}\right)^{\nu} \underset{\nu \rightarrow \infty}{\approx} e^{-\tilde{x}/R}, \quad \tilde{x} = x - x_0.$$

Соответственно для перехода от потенциала $U = \tilde{\alpha}/x^{\nu}$ к экспоненциальному $U = U_0 e^{-x/R}$ надо положить

$$\tilde{\alpha}/x_0^{\nu} \equiv \tilde{\alpha}/(\nu R)^{\nu} = U_0, \quad \text{т. е.} \quad \tilde{\alpha} = (\nu R)^{\nu} U_0. \quad (12)$$

Подставив (12) в (7) (при этом $\alpha = 2m\tilde{\alpha}/\hbar^2$) и выполнив предельный переход $\nu \rightarrow \infty$, получаем $\beta = \sqrt{2\pi R}$ и согласно (9) приходим к соотношению (11) для потенциала с экспоненциальным убыванием.

9.27. Отражение частиц обусловлено, главным образом, наличием особенности потенциала в точке $x = 0$. В.ф., описывающая процесс отражения (и прохождения) частиц, падающих на барьер, для определенности, слева, в квазиклассическом приближении имеет вид

$$\Psi^+(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\rho(x)}} \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx\right) + \right. \\ \left. + A \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx\right) \right\}, & x < 0, \\ \frac{B}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^x p dx\right), & x > 0, \end{cases} \quad (1)$$

здесь $\rho = \sqrt{2m(E - U(x))} > 0$; при этом коэффициент отражения равен $R(E) = |A|^2$. Из условий непрерывности в.ф. и ее производной в точке $x = 0$ (при этом ввиду квазиклассичности достаточно дифференцировать лишь экспоненциальные сомножители, как наиболее быстро изменяющиеся) получаем

$$\sqrt{\rho_2} (1 + A) = \sqrt{\rho_1} B, \quad \sqrt{\rho_1} (1 - A) = \sqrt{\rho_2} B,$$

где $\rho_{1,2} = \sqrt{2m(E - U_{1,2})}$. Отсюда $A = (\rho_1 - \rho_2)/(\rho_1 + \rho_2)$ и коэффициент отражения оказывается равным

$$R(E) = \frac{(\sqrt{E - U_1} - \sqrt{E - U_2})^2}{(\sqrt{E - U_1} + \sqrt{E - U_2})^2}. \quad (2)$$

Подчеркнем, что при конечных значениях энергии справедливость формулы (2) не предполагает малости $R(E)$. Однако при

$E \rightarrow \infty$ из нее следует

$$R \approx \frac{(U_2 - U_1)^2}{16E^2} \rightarrow 0,$$

что соответствует результату теории возмущений, сравнить с 8.30.

9.28. Рассматриваемый уровень при наложении поля отвечает квазистационарному состоянию. Положение E_0 и ширина Γ квазидискретных уровней определяются условиями существования решений у. Ш. для комплексных значений энергии $E = E_0 - \frac{i}{2} \Gamma$, имеющих при $x \rightarrow \pm\infty$ вид *уходящей* волны (если в каком-либо направлении движения $U(x) > E_0$, то в этом направлении решение является экспоненциально убывающим), сравнить с 6.36.

В данной задаче решение у. Ш. в квазиклассическом приближении имеет вид ³¹⁾ (см. рис. 33):

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_x^0 \rho(x) dx\right), & x < 0, \end{cases} \quad (1.1)$$

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_x^b \rho(x) dx\right), & 0 < x < b, \end{cases} \quad (1.2)$$

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x \rho(x) dx\right), & x > b, \end{cases} \quad (1.3)$$

где $\rho(x) = \sqrt{2m(E + F_0x)}$ (подчеркнем, что в классически запрещенных областях в пренебрежении шириной $\rho(x)$ — чисто мнимая величина, причем $i\rho(x) < 0$). Здесь использовано известное условие сшивания решений в окрестности точки поворота $x = b$, см. [1, § 50], при этом в (1.2) оставлено лишь экспоненциально растущее в глубь барьера слагаемое.

Сшивание решения в точке $x = 0$, см. 2.6, дает

$$A = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^b \rho(x) dx\right), \quad A + C \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^b \rho(x) dx\right) = (2i\alpha/\hbar\rho(0)) A \quad (2)$$

³¹⁾ Строго говоря, теперь точки остановки из-за ширины уровня являются комплексными; однако ввиду экспоненциальной малости Γ это обстоятельство не отражается на условиях сшивания решения.

(при вычислении производных в. ф. дифференцируются лишь экспоненциальные множители как наиболее быстро изменяющиеся в условиях квазиклассичности, см., однако, ниже (6)). Отсюда получаем $\hbar p(0) = im\alpha$, или $E = E_0^{(0)} = -m\alpha^2/2\hbar^2$, что совпадает с энергией уровня в отсутствие возмущения $V = -F_0x$.

Как видно, в рассматриваемом приближении непосредственно не получены ни сдвиг, ни ширина уровня! Для получения сдвига уровня следовало бы воспользоваться более точными квазиклассическими выражениями для в. ф., учитывающими следующие поправки по \hbar , см. ниже.

Что же касается ширины уровня, то она «исчезла» по той причине, что в области барьера $0 < x < b$ была опущена экспоненциально убывающая от точки $x = b$ в глубь его часть решения. Вычисления, основанные на ее учете, несколько громоздки³²⁾, но их можно избежать, используя следующие соображения.

Имея в виду физический смысл Γ как величины, определяющей вероятность распада системы (в данной задаче — прохождение частицы через барьер) в единицу времени: $\omega = \Gamma/\hbar$, найдем в рассматриваемом состоянии плотность потока справа от точки поворота $x = b$. Используя (1.3), получаем

$$j = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial x} \Psi^* \right) = \frac{|C|^2}{m}. \quad (3)$$

При этом если в. ф. нормирована таким образом, что частица с вероятностью ≈ 1 находится в окрестности ямы, то плотность потока непосредственно определяет вероятность распада в единицу времени, $\omega = j$. Как видно из (1.1) и (1.2), плотность вероятности $|\Psi|^2$ существенно отлична от нуля лишь при значениях

$$|x| \leq \sqrt{\hbar^2/2m|E|} \approx \hbar^2/m\alpha,$$

и если при этом

$$F_0 \cdot \hbar^2/m\alpha \ll |E_0|, \quad \text{т. е.} \quad F_0 \ll m^2\alpha^3/\hbar^4 \quad (4)$$

(что и предполагается), то в $p(x)$ можно опустить член с F_0x . В результате для в. ф., нормированной на единицу в существенной

³²⁾ Вывод формулы для ширины уровня таким способом см. в [9, § 2].

области локализации частицы вблизи ямы, получаем

$$|\Psi|^2 \approx |\rho(0)|^{-1} A^2 \exp(-2m\alpha|x|/\hbar^2), \quad A^2 = m^2\alpha^2/\hbar^3$$

(в рассматриваемом приближении в. ф. в этой области совпадает с невозмущенной полем в. ф. связанного состояния в δ -яме). Согласно (2) имеем

$$|C|^2 \exp\left(\frac{2}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m(|E_0| - F_0x)} dx\right) = A^2 = \frac{m^2\alpha^2}{\hbar^3}.$$

После элементарного интегрирования получаем значение $|C|^2$, а с ним и ширину уровня

$$\Gamma = \frac{\hbar|C|^2}{m} = \frac{m\alpha^2}{\hbar^2} \exp\left(-\frac{2}{3} \frac{m^2\alpha^3}{\hbar^3 F_0}\right). \quad (5)$$

Вернемся к вопросу о сдвиге уровня. Воспользовавшись в (1) более точными выражениями для квазиклассических волновых функций, см. [1, § 46]:

$$\Psi = \frac{C}{\sqrt{\rho(x)}} \left(1 \mp \frac{i\hbar}{4} \frac{F}{\rho^3} \mp \frac{i m^2 \hbar}{8} \int_0^x \frac{F^2}{\rho^5} dx\right) \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_0^x \rho dx\right)$$

и выполняя при сшивании решения в точке $x=0$ дифференцирование также и предэкспоненциальных множителей, можно получить уточнение формул (2) и найти

$$i\rho(0) + \frac{5i}{8} \frac{m^2 \hbar^2 F_0^2}{\rho^5(0)} = -\frac{m\alpha}{\hbar}.$$

Заменяя во втором, поправочном члене $\rho(0)$ его невозмущенным значением $i m \alpha / \hbar$, находим

$$E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} - \frac{5}{8} \frac{\hbar^6 F_0^2}{m^3 \alpha^4}. \quad (6)$$

Второе слагаемое здесь определяет искомый сдвиг уровня (и поляризуемость состояния) и совпадает с точным результатом второго порядка теории возмущений, см. 8.12, а также 6.36, где сдвиг и ширина уровня получены из точного решения уравнения Шрёдингера.

9.29. В квазиклассическом приближении решение у. Ш. для квазистационарных состояний имеет вид ³³⁾

$$\frac{\sqrt{i}C}{2\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_x^{a_1} p(x) dx\right), \quad x < a_1; \quad (1.1)$$

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^x p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right), \quad a_1 < x < b_1; \quad (1.2)$$

$$\Psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_x^{a_2} p dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_x^{a_2} p dx\right), \quad b_1 < x < a_2; \quad (1.3)$$

$$\frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{a_2}^x p(x) dx\right), \quad x > a_2. \quad (1.4)$$

Здесь (1.1) экспоненциально убывает при $x \rightarrow -\infty$; (1.2) записано с учетом условия сшивания решения (IX.4). Далее, в выражениях (1.3) и (1.4) фигурирует один и тот же коэффициент C_1 , как это следует из условия сшивания решения в окрестности точки $x = a_2$ согласно [1, § 50]. Пренебрегая в (1.3) вторым, экспоненциально убывающим в глубь барьера (от точки $x = a_2$) слагаемым, для сшивания решения в окрестности точки $x = b_1$ можно уже воспользоваться условиями (IX.3). Отсюда сразу приходим к правилу квантования Бора — Зоммерфельда для определения E_{0n} — положений квазидискретных уровней и к соотношению между коэффициентами

$$C_1 = \frac{\sqrt{i}}{2} (-1)^n \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p(x)| dx\right) C.$$

Воспользовавшись теперь значением $|C|^2 = 4m/T(E_{0n})$, обеспечивающим нормировку на единицу в. ф. (1) в области движения классической частицы $a_1 < x < b_1$, и вычислив поток вероятности при $x > a_2$ (сравнить с предыдущей задачей), приходим

³³⁾ См. ряд общих замечаний о рассмотрении квазистационарных состояний в квазиклассическом приближении, сделанных в предыдущей задаче.

к следующему выражению для ширины рассматриваемых квази-стационарных состояний:

$$\Gamma_n = \hbar \omega_n = \frac{\hbar D(E_{0n})}{T(E_{0n})} = \frac{\hbar \omega(E_{0n})}{2\pi} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx\right). \quad (2)$$

Отметим наглядный смысл ω_n здесь: вероятность подбарьерного вылета частицы из ямы в единицу времени равна числу ударов $1/T$ о барьер классической частицы в единицу времени, умноженному на вероятность проникновения через него при однократном столкновении. В таком виде выражение для ширины уровня имеет более широкую область применимости, так как не связано с (квазиклассическим) способом вычисления проникаемости барьера; сравнить, например, с 6.37. Если барьер имеет конечную проникаемость по обе стороны от ямы, то тогда очевидно

$$\Gamma_n = \frac{\hbar \omega}{2\pi} (D_1 + D_2).$$

Рассмотрим приложение полученных результатов к осциллятору с ангармоничностью: $U = m\omega^2 x^2/2 - \lambda x^3$. Сдвиги уровней невозмущенного осциллятора были вычислены в задачах 9.10 и 9.13. Расчет ширин уровней согласно (2) сводится к вычислению интеграла

$$\int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \left[\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - \lambda x^3 - E_{0n} \right]} dx. \quad (3)$$

Для его приближенного вычисления разобьем область интегрирования на две: от x_1 до d и от d до x_2 , где величина d предполагается удовлетворяющей условиям

$$\sqrt{E_{0n}/m\omega^2} \ll d \ll m\omega^2/\lambda. \quad (4)$$

При этом можно в первом интеграле рассматривать как малую поправку λx^3 , а во втором — слагаемое с E_{0n} и выполнить разложение по этим параметрам. Поступая таким образом, находим

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^d |p| dx &\approx \frac{1}{\hbar} \int_{x_{10}}^d \left\{ \sqrt{(m\omega x)^2 - 2mE_{0n}} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\lambda m x^3}{\sqrt{(m\omega x)^2 - 2mE_{0n}}} \right\} dx \approx \\ &\approx \frac{m\omega d^2}{2\hbar} - \frac{E_{0n}}{2\hbar\omega} - \frac{E_{0n}}{2\hbar\omega} \ln \frac{2m\omega^2 d^2}{E_{0n}} - \frac{\lambda d^3}{3\hbar\omega}, \end{aligned} \quad (5)$$

а также

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_d^{x_2} |p| dx &\approx \\ &\approx \frac{1}{\hbar} \int_d^{x_{20}} \left\{ \sqrt{(m\omega x)^2 - 2m\lambda x^3} - \frac{mE_{0n}}{\sqrt{(m\omega x)^2 - 2m\lambda x^3}} \right\} dx \approx \\ &\approx \frac{m^3\omega^5}{15\hbar\lambda^2} - \frac{m\omega d^2}{2\hbar} + \frac{\lambda d^3}{3\hbar\omega} - \frac{E_{0n}}{\hbar\omega} \ln \frac{2m\omega^2}{d\lambda}. \end{aligned} \quad (6)$$

Сумма выражений (5) и (6) определяет показатель экспоненты в формуле (2), а с ним и искомую ширину уровня (при этом введенная лишь для удобства вычислений величина d в окончательный результат не входит):

$$\Gamma_n = \frac{\hbar\omega}{2\pi} \left[\frac{8m^3\omega^5}{\lambda^2\hbar(n+1/2)} \right]^{n+1/2} \exp \left\{ -\frac{2m^3\omega^5}{15\lambda^2\hbar} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \right\}, \quad (7)$$

здесь E_{0n} заменено невозмущенным значением $\hbar\omega(n+1/2)$.

9.30. Качественный вид эффективного потенциала

$$U_{\text{эф}} = U_S(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

приведен на рис. 36; на малых расстояниях $r \rightarrow 0$ и в области значений $r > r_S$ доминирует центробежный потенциал. При этом $U_0 \geq \hbar^2/mr_S^2$, так как в противном случае «мелкой» ямы как истинно связанных, с $E < 0$, так и квазистационарных, с $E > 0$, состояний не существует. Для радиальной функции $\chi = rR$ (см. (IV.5)) можно воспользоваться общими формулами одномерной квазиклассики.

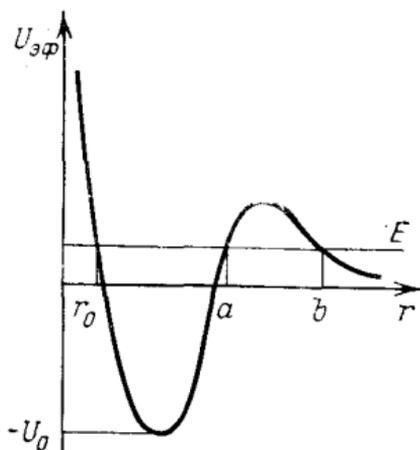


Рис. 36

Вычислив интеграл ($E = \hbar^2 k^2/2m$)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p_r| dr &\approx \int_a^b \sqrt{\frac{(l+1/2)^2}{r^2} - k^2} dr \approx \\ &\approx \int_a^b \frac{(2l+1) dr}{2r} \sim \frac{2l+1}{2} \ln \frac{2l+1}{2kr_S} \end{aligned} \quad (1)$$

(здесь точки остановки $a \sim r_S$ и $b \approx (l + 1/2)/k$; в центробежном потенциале сделана поправка Лангера, т. е. произведена замена $l(l + 1)$ на $(l + 1/2)^2$), по квазиклассической формуле (IX.7) получаем оценку проницаемости центробежного барьера

$$D \sim \left(\frac{2kr_S}{2l + 1} \right)^{2l+1} \propto (kr_S)^{2l+1} \quad (2)$$

(обратить внимание на ее энергетическую зависимость).

Заметим, что использование аналогичного (1) выражения для барьера, отделяющего начало координат (с заменой в нем b на r_0 и r_S на $r < b$), дает

$$\chi_{\text{кв}} = \frac{C}{\sqrt{|p_r|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_r^{r_0} |p_r| dr \right) \propto r^{l+1}$$

в согласии с точным результатом, $R_l = \chi/r \propto r^l$.

Для оценки времени жизни квазистационарного состояния³⁴⁾ τ найдем вероятность w вылета частицы из ямы в единицу времени. Эта вероятность получается умножением числа ударов

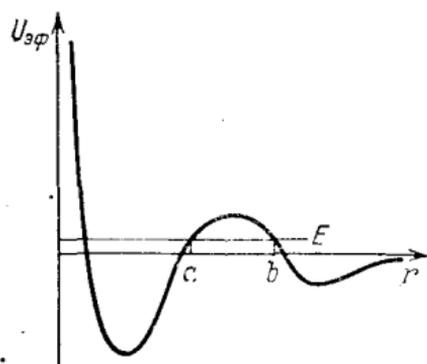


Рис. 37

частицы о барьер в единицу времени, по порядку величины равного³⁵⁾ $v_S/r_S \sim \hbar/mr_S^2$, на вероятность прохождения барьера при однократном столкновении, совпадающую с D (сравнить с предыдущей задачей), что дает

$$\tau = \frac{1}{w}, \quad w \sim \frac{\hbar}{mr_S^2} \left(\frac{2kr_S}{2l + 1} \right)^{2l+1} \quad (3)$$

(более точное выражение для τ см. в связи с (XIII.17)); сравнить энергетическую зависимость $w \propto k^{2l+1}$ для центробежного барьера в случае медленных частиц с экспоненциальной зависимостью для кулоновского барьера, см. следующую задачу.

³⁴⁾ В квазиклассическом приближении энергия квазистационарного состояния, как и истинно связанного, определяется правилом квантования Бора — Зоммерфельда, сравнить с предыдущей задачей.

³⁵⁾ Здесь $v_S = p_S/m$ — характерная скорость частицы в яме $p_S \sim \sqrt{mU_0} \geq \hbar/r_S$ (не путать p_S с импульсом $p = \hbar k$ вылетающей частицы, $p_S \gg \hbar k$).

9.31. График эффективного потенциала приведен на рис. 37. Теперь для состояний с малой энергией ($E \rightarrow 0$):

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p_r| dr \approx \int_a^b \left\{ \frac{(l+1/2)^2}{r^2} - \frac{2}{a_B r} \right\}^{1/2} dr \approx \frac{2l+1}{2} \left\{ \ln \frac{(2l+1)^2 a_B}{2r_S} - 2 \right\}, \quad (1)$$

здесь $a \approx r_S$, $b = (l+1/2)^2 a_B / 2$ и учтено, что $r_S \ll a_B$. Соответственно

$$D \sim \left(\frac{2e^2 r_S}{(2l+1)^2 a_B} \right)^{2l+1} \sim \frac{1}{[(2l+1)!]^2} \left(\frac{2r_S}{a_B} \right)^{2l+1} \quad (2)$$

(в последнем выражении использована формула Стирлинга).

Заметим, что кулоновское притяжение «укорачивает» центробежный барьер и для малых энергий, $E \rightarrow 0$, существенно изменяет (увеличивает) его проницаемость, сравнить с предыдущей задачей.

Наоборот, в случае отталкивательного характера кулоновского потенциала проницаемость барьера для медленных частиц резко падает. При этом доминирующую роль в интеграле ($E = mv^2/2$, $U_C = \alpha/r$)

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p_r| dr \approx \frac{1}{\hbar} \int_0^{\alpha/E} \sqrt{\frac{2m\alpha}{r} - (mv)^2} dr = \frac{\pi\alpha}{\hbar v}$$

играют большие расстояния, на которых центробежный потенциал мал. Его учет изменяет лишь предэкспоненциальный множитель в выражении

$$D(E) \sim e^{-2\pi\alpha/\hbar v} \quad (3)$$

для проницаемости барьера; сравнить (3) с выражением (2), а также с формулой (2) предыдущей задачи для проницаемости центробежного барьера.

Г л а в а 10

ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ. ВТОРИЧНОЕ КВАНТОВАНИЕ

10.1. Спировые функции системы (не симметризованные в спинах) имеют вид ¹⁾ $\chi_{s_z}(1) \chi_{s_z}(2)$, их число равно $(2s+1)^2$.

¹⁾ Здесь χ_{s_z} — нормированная спиновая функция отдельной частицы с определенным значением проекции спина s_z . В s_z -представлении она имеет вид $\chi_{s_z}(\sigma) = \delta_{\sigma, s_z}$.

Следующие комбинации этих функций

$$\Psi_{s_z s_z}^+ = \chi_{s_z}(1) \chi_{s_z}(2), \quad (1)$$

$$\Psi_{s_z s_z'}^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \chi_{s_z}(1) \chi_{s_z'}(2) \pm \chi_{s_z'}(1) \chi_{s_z}(2) \right\}, \quad s_z \neq s_z'$$

нормированные на единицу, имеют определенную симметрию относительно перестановки частиц: Ψ^+ — симметричные, а Ψ^- — антисимметричные функции. Число независимых симметричных состояний равно $(s+1)(2s+1)$, а антисимметричных — $s(2s+1)$.

Приведенные функции не отвечают, вообще говоря, определенному значению S суммарного спина частиц (исключая случай $s = 1/2$, см. 5.10). Однако имея в виду результат 3.30, можно утверждать, что в симметричных состояниях представлены значения $S = 2s, 2s - 2, 2s - 4, \dots$, а в антисимметричных — $S = 2s - 1, 2s - 3, \dots$ (при этом, конечно, $S \geq |s_z + s_z'|$).

10.2. С учетом спина в.ф. рассматриваемых одночастичных состояний имеют вид

$$\psi_{i, s_z, i} = \varphi_i(\mathbf{r}) \chi_{s_z, i}(\sigma),$$

где χ_{s_z} — спиновая функция (индекс i у s_z, i подчеркивает, что для разных орбитальных состояний s_z имеет свое значение). Задание значений s_z, i однозначно определяет n различных одночастичных состояний

$$\psi_{1, s_z, 1}, \psi_{2, s_z, 2}, \dots, \psi_{n, s_z, n} \quad (1)$$

и единственное состояние системы из n одинаковых частиц в целом, волновая функция которого получается симметризацией (или антисимметризацией) произведения функций (1), см. следующую задачу. Любое изменение набора значений s_z, i приводит к новому набору одночастичных состояний (1), а соответственно и к новому состоянию системы в целом (при этом существенно, что все в.ф. φ_i — различные!). Так как каждое s_z, i принимает $(2s+1)$ значений, то общее число различных наборов одночастичных состояний (1), а с ним и число независимых состояний системы равно $(2s+1)^n$.

Для системы различных частиц важен способ их размещения по различным одночастичным состояниям. Число различных орбитальных состояний при этом равно $n!$, а общее число состояний системы с учетом спиновых степеней свободы составляет $(2s+1)^n n!$.

10.3. Для бозонов вид волновой функции системы зависит от того, совпадают или нет занятые одночастичные состояния. При этом следует различать три случая.

1) Все частицы — в одинаковом состоянии, $f_1 = f_2 = f_3 = f$. Нормированная на единицу в.ф. системы $\Psi = \psi_f(1)\psi_f(2)\psi_f(3)$ (здесь и ниже вместо переменных частицы указываем лишь ее номер, так $\psi(1) \equiv \psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1)$ и т. д.).

2) Два из трех занятых состояний совпадают. Теперь

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \psi_1(1) \psi_2(2) \psi_2(3) + \psi_2(1) \psi_1(2) \psi_2(3) + \psi_2(1) \psi_2(2) \psi_1(3) \} \quad (1)$$

(для определенности положено $f_1 \neq f_2 = f_3$ и для краткости записи указываем индекс a вместо f_a). Вид выражения в фигурных скобках определяется из условия симметрии в.ф. по отношению к перестановке переменных ξ любых двух частиц. Коэффициент $1/\sqrt{3}$ выбран из условия нормировки в.ф. Ψ на единицу:

$$\int |\Psi|^2 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 = 1, \quad \int \psi_a^*(\xi) \psi_b(\xi) d\xi = \delta_{ab} \quad (2)$$

(интегрирование по ξ включает и суммирование по спиновой переменной); при вычислении нормировочного интеграла из девяти слагаемых в $|\Psi|^2$ отличный от нуля вклад дают лишь три из-за указанной в (2) ортогональности волновых функций одночастичных состояний.

3) Если все три занятые состояния различны, то

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \psi_1(1) \psi_2(2) \psi_3(3) + \psi_2(1) \psi_3(2) \psi_1(3) + \psi_3(1) \psi_1(2) \psi_2(3) \pm \psi_1(1) \psi_3(2) \psi_2(3) \pm \psi_3(1) \psi_2(2) \psi_1(3) \pm \psi_2(1) \psi_1(2) \psi_3(3) \}, \quad (3)$$

при этом следует выбрать верхние знаки.

В случае фермионов все три занятые состояния должны быть различными и антисимметричная волновая функция системы определяется выражением (3) с выбором в нем нижних знаков.

10.4. Так как координатная часть волновой функции системы, имеющая вид $\varphi(\mathbf{r}_1)\varphi(\mathbf{r}_2)\varphi(\mathbf{r}_3)$, симметрична, то спиновая часть в.ф. также должна быть симметричной относительно взаимной перестановки частиц. Несимметризованные в спинах функции имеют вид

$$\chi_{s_z, 1}(\sigma_1) \chi_{s_z, 2}(\sigma_2) \chi_{s_z, 3}(\sigma_3),$$

где $\chi_{s_z}(\sigma)$ — спиновая функция отдельной частицы с определенным значением проекции спина s_z . Их число равно $3 \times 3 \times 3 = 27$, однако условие симметричности существенно уменьшает

число независимых состояний. Такие состояния отвечают различным наборам $\{s_z, a\}$ значений s_z отдельных частиц (не сводящимся к взаимной перестановке $s_z, a!$), а соответствующие спиновые функции системы получаются в результате симметризации одночастичных спиновых функций, сравнить с предыдущей задачей.

Так, например, для набора значений $s_{z,1} = s_{z,2} = s_{z,3} = 1$ имеем

$$\psi_{111} = \chi_1(1) \chi_2(2) \chi_1(3) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_3, \quad (1)$$

а для набора $s_{z,1} = s_{z,2} = 1, s_{z,3} = 0$

$$\begin{aligned} \psi_{110} = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ & \chi_1(1) \chi_1(2) \chi_0(3) + \chi_1(1) \chi_0(2) \chi_1(3) + \\ & + \chi_0(1) \chi_1(2) \chi_1(3) \} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 + \right. \\ & \left. + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_3 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_3 \right\}. \quad (2) \end{aligned}$$

Выпишем также другие наборы значений $(s_{z,1}, s_{z,2}, s_{z,3})$, приводящие к новым независимым состояниям системы: $(1, 1, -1)$, $(1, 0, 0)$, $(1, 0, -1)$, $(1, -1, -1)$, $(0, 0, 0)$, $(0, 0, -1)$, $(0, -1, -1)$, $(-1, -1, -1)$. Как видно, общее число независимых спиновых состояний системы равно 10.

Из этих 10 состояний 7 соответствуют значению $S = 3$ суммарного спина системы, а 3 — значению $S = 1$. Действительно, очевидно, что спиновая функция (1) отвечает $S = 3$. Также $S = 3$ отвечает и функция (2), как единственное состояние с $S_z = 2$. Значение $S_z = 1$ имеют два состояния: $(1, 1, -1)$ и $(1, 0, 0)$. Существование одного из них связано с суммарным спином $S = 3$, а другого — с $S = 1$.

10.5. Полный момент двух пионов в их системе ц.и. (она же — система покоя частицы A^0) совпадает с орбитальным моментом L их относительного движения и в силу сохранения момента равен спину частицы A^0 , так что $J_A = L$. Но из условия симметричности в.ф. двух π^0 -мезонов следует, что L может принимать лишь четные значения, и поэтому $J_A = 0, 2, 4, \dots$ (действительно, перестановка пионов эквивалентна отражению координат в их системе ц.и., так как $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, и приводит к умножению в.ф. на $(-1)^L$). При этом четность двухпионной системы — положительна и если она сохраняется в распаде, то $P_A = +1$.

10.6. В условиях задачи квантовые числа π - d -системы таковы: $J = J_d = 1$ — полный момент, $P = P_\pi$ — четность, совпадающая с четностью пиона. В силу сохранения момента два нейтрона в конечном состоянии также имеют полный момент $J = 1$ (в системе ц. и.), и так как для них $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ (L — орбитальный момент относительного движения, S — суммарный спин, спин нейтрона $s = 1/2$), то возможны лишь следующие значения L и S :

- 1) $L = 0, S = 1$; 2) $L = 1, S = 0$; 3) $L = 1, S = 1$,
4) $L = 2, S = 1$. (1)

Легко заметить, что условие антисимметричности волновой функции системы из двух нейтронов запрещает им находиться в состояниях с квантовыми числами наборов 1), 2) и 4). Для этого следует учесть, что спиновые функции с $S = 1$ и $S = 0$ соответственно симметричны и антисимметричны (см. 5.10), а симметрия координатных функций с данным значением орбитального момента L совпадает с четностью этих функций $(-1)^L$ (так как перестановка координат эквивалентна их отражению относительно центра масс, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$). Таким образом, при полном моменте $J = 1$ система двух нейтронов может иметь только квантовые числа $L = 1$ и $S = 1$, а соответственно и отрицательную четность. Отсюда следует, что $P_\pi = -1$ и пион, как говорят, является *псевдоскалярной* частицей, т. е. у него $J_\pi^P = 0^-$.

10.7. Задача о возможных состояниях рассматриваемой системы из трех одинаковых бозонов по существу эквивалентна 10.4, а волновые функции могут быть получены заменой спиновых функций χ_{sz} в 10.4 на шаровые функции $Y_{lm}(\mathbf{n})$. Отсюда, в частности, следует, что полный орбитальный момент может принимать лишь значения $L = 3$ и $L = 1$.

Факт отсутствия у рассматриваемой системы состояния с суммарным орбитальным моментом $L = 0$ более наглядно следует из вида волновой функции $\Psi_{L=0}$. В условиях задачи в. ф. трех независимых состояний частицы с $l = 1$ могут быть выбраны в виде $\psi_i = x_i f(r)$, где x_i — компоненты радиуса-вектора \mathbf{r} , см. 3.21. При этом в. ф. (несимметризованные!) для системы из трех частиц с $l = 1$ имеют вид

$$\Psi_{ikl} = x_{1i} x_{2k} x_{3l} f(r_1) f(r_2) f(r_3). \quad (1)$$

Волновая функция состояния с суммарным моментом $L = 0$ является скаляром (не изменяется при вращениях системы координат). Из волновых функций (1) можно составить только одну скалярную (точнее, псевдоскалярную) функцию:

$$\Psi_{L=0} = (\mathbf{r}_1 [\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3]) f(r_1) f(r_2) f(r_3), \quad (2)$$

но она антисимметрична относительно перестановки частиц и не может описывать состояния системы одинаковых бозонов.

10.8. Перестановка координат двух частиц эквивалентна их отражению относительно центра масс (так как $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$). Поэтому симметрия координатной части волновой функции состояния с данным значением L момента относительного движения совпадает с орбитальной четностью состояния, равной $(-1)^L$. Соответственно условие симметричности в.ф. системы тождественных бозонов требует, чтобы в четных состояниях перестановка спиновых переменных частиц не изменяла волновой функции, а в нечетных состояниях приводила к изменению знака в.ф. Отсюда, имея в виду результат задачи 3.30 о характере симметрии в.ф. при сложении двух одинаковых моментов, заключаем, что в состояниях с орбитальным моментом $L = 0, 2, 4, \dots$ возможны лишь значения суммарного спина $S = 2s, 2s - 2, \dots, 0$, а для состояний с $L = 1, 3, 5, \dots$, возможны лишь $S = 2s - 1, 2s - 3, \dots, 1$.

В частности, для бесспиновых бозонов, $s = 0$, возможны только четные значения L . Следствием этого результата является, например, *запрет* на распады нейтральной частицы со спином $S_V = 1$ (векторного мезона) на два π^0 -мезона, см. также 10.5.

10.9. В системе из двух тождественных фермионов при четных значениях L орбитального момента суммарный спин может принимать также только четные значения $S = 2s - 1, 2s - 3, \dots, 0$, а при нечетных L возможны только нечетные $S = 2s, 2s - 2, \dots, 1$; сравнить с предыдущей задачей, а также с 10.6.

10.10. Нормированная в.ф. системы имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_2(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_2) \}. \quad (1)$$

Вероятность нахождения обеих частиц одновременно в одном и том же объеме dV равна

$$dw_{\text{боз}} = |\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2 dV dV = \\ = |\psi_1(\mathbf{r})|^2 dV \cdot |\psi_2(\mathbf{r})|^2 dV + |\psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r})|^2 (dV)^2, \quad (2)$$

что больше аналогичной вероятности

$$dw_{\text{разл}} = |\psi_1(\mathbf{r})|^2 dV \cdot |\psi_2(\mathbf{r})|^2 dV \quad (3)$$

в случае различимых частиц. Этот результат иллюстрирует существование интерференции между различными (но тождественными!) частицами. Качественно эту интерференцию можно охарактеризовать как тенденцию бозонов к взаимному сближению. Несколько иной аспект такой интерференции рассмотрен в следующей задаче.

Подобная интерференция между различными тождественными частицами, находящимися в одинаковых спиновых состояниях, имеет место и в случае фермионов. При этом $d\omega_{\text{ферм}} = 0$ и характер интерференции можно описать как тенденцию фермионов к взаимному отталкиванию. Для частиц (как фермионов, так и бозонов) в различных (ортогональных) спиновых состояниях отмеченная интерференция не проявляется.

10.11. Нормированная на единицу волновая функция системы имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C \{ \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_2(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_2) \}, \quad (1)$$

где $2C^2 = (1 + |\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle|^2)^{-1}$. Средняя плотность частиц получается усреднением соответствующего оператора

$$\hat{n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_a) \equiv n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_a) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a), \quad (2)$$

где суммирование проводится по всем частицам системы. Такой вид оператора связан с тем, что аналогичная ему классическая величина зависит только от координат частиц (но не от их импульсов, сравнить с оператором потенциальной энергии $\hat{U}(\mathbf{r}_a) = U(\mathbf{r}_a)$ в координатном представлении), при этом \mathbf{r} выступает как «внешний» параметр. Очевидно

$$\bar{n}(\mathbf{r}) = \langle \Psi | \hat{n}(\mathbf{r}) | \Psi \rangle = 2C^2 \{ |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2 + \Delta(\mathbf{r}) \}, \quad (3)$$

где

$$\Delta(\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{r}) \psi_2^*(\mathbf{r}) \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \psi_2(\mathbf{r}) \psi_1^*(\mathbf{r}) \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle.$$

Обсудим полученный результат для $\bar{n}(\mathbf{r})$. Прежде всего отметим, что, как и следовало ожидать, $\int \bar{n}(\mathbf{r}) dV = 2$ независимо от вида функций $\psi_{1,2}(\mathbf{r})$. Далее, если эти функции ортогональны, так что $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0$, то $C^2 = 1/2$, $\Delta(\mathbf{r}) = 0$ и

$$\bar{n}(\mathbf{r}) = |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2 \equiv \bar{n}_{\text{разл}}(\mathbf{r}), \quad (4)$$

как и в случае различимых частиц. Однако если $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \neq 0$, то $\bar{n}(\mathbf{r})$ отличается от $\bar{n}_{\text{разл}}(\mathbf{r})$. В этом проявляется отмеченная уже в предыдущей задаче интерференция между различными (но тождественными!) частицами. Так как $2C^2 < 1$, то в тех областях пространства, где в.ф. $\psi_{1,2}(\mathbf{r})$ не «перекрываются» (так что $\psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) \approx 0$), имеем $\bar{n} < \bar{n}_{\text{разл}}$. Соответственно, учитывая нормировку $\bar{n}(\mathbf{r})$, заключаем, что в существенной области перекрытия в.ф. уже $\bar{n} > \bar{n}_{\text{разл}}$ в согласии с характером интерференции — тенденцией бозонов к взаимному сближению. Случаю фермионов, находящихся в одинаковых спиновых состояниях,

соответствует изменению в (1), (3) знака слагаемых, содержащих $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle$ и противоположный характер интерференции — взаимное отталкивание, сравнить с 10.10.

10.12. Записав

$$\hat{a} = \frac{1}{2}(\hat{a} + \hat{a}^+) + i \frac{1}{2i}(\hat{a} - \hat{a}^+) \equiv \hat{A} + i\hat{B},$$

(при этом $\hat{A} = (\hat{a} + \hat{a}^+)/2$), находим $[\hat{A}, \hat{B}] = i/2$.

10.13. Записав $\hat{a} = \alpha \hat{x} + \beta \hat{p}$ и $\hat{a}^+ = \alpha^* \hat{x} + \beta^* \hat{p}$, имеем

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = i\hbar(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta) = 1.$$

Как видно, выбор параметров α, β не однозначен. Можно взять, например,

$$\alpha = 1/\sqrt{2} L, \quad \beta = iL/\sqrt{2} \hbar$$

(L — вещественный параметр с размерностью длины, как и у координаты x). При этом из условия $\hat{a}|0\rangle = 0$, или

$$\left(\frac{x}{L} + L \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi_0(x) = 0,$$

находим волновую функцию «вакуумного» состояния:

$$\Psi_0(x) = (\pi L^2)^{-1/4} \exp(-x^2/2L^2)$$

(сравнить с в. ф. основного состояния линейного осциллятора).

10.14. Для бозонных операторов — нельзя, так как при этом $[\hat{a}', \hat{a}'^+] = -1$ (в отличие от $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$).

В случае фермионных операторов — можно, так как по-прежнему $\hat{a}'^2 = 0$ и $\{\hat{a}', \hat{a}'^+\}_+ = 1$. При этом вакуумное состояние «новых» частиц $|0'\rangle$ является одночастичным состоянием $|1\rangle$ исходных частиц, т. е. $|0'\rangle = |1\rangle$, и наоборот: $|1'\rangle = |0\rangle$. Такие «новые» частицы называют дырками (на фоне исходных частиц). Для фермионов рассматриваемое преобразование является унитарным и осуществляется оператором $\hat{U} = \hat{a} + \hat{a}^+$, так что при этом $\hat{a}' = \hat{U}\hat{a}\hat{U}^+ = \hat{a}^+$.

10.15. Напомним, что операторы \hat{a} и \hat{a}^+ действуют в пространстве функций²⁾ — векторов состояний

$$|\Psi\rangle = \sum c_n |n\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle + \dots,$$

где символ $|n\rangle$ соответствует n -частичному состоянию. При этом

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

Для фермионов $|n \geq 2\rangle = 0$ (таких состояний нет).

²⁾ Здесь и ниже суммирование по n во всех формулах ведется от $n = 0$ до $n = \infty$.

Собственные функции $|\alpha\rangle \equiv \sum c_n |n\rangle$ и собственные значения α бозонного оператора \hat{a} определяются из уравнения $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$. Так как

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \hat{a} \sum c_n |n\rangle = \sum c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle,$$

то уравнение принимает вид

$$\sum_n (c_{n+1} \sqrt{n+1} - \alpha c_n) |n\rangle = 0. \quad (1)$$

Отсюда, с учетом независимости состояний $|n\rangle$, следует

$$c_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} c_n = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} \cdot \frac{\alpha}{\sqrt{n}} c_{n-1} = \dots = \frac{\alpha^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} c_0. \quad (2)$$

Как видно, собственным значением бозонного оператора \hat{a} является любое комплексное число α (оператор \hat{a} — неэрмитов!), а соответствующая с. ф. $|\alpha\rangle$ может быть нормирована на единицу. Условие $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ дает

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_n |c_n|^2 = |c_0|^2 \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = 1, \quad \text{т. е. } |c_0|^2 = e^{-|\alpha|^2}, \quad (3)$$

так что распределение по числу частиц в состоянии $|\alpha\rangle$ определяется выражением

$$w_n = |c_n|^2 = \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \quad (4)$$

и представляет собой распределение Пуассона с $\bar{n} = |\alpha|^2$.

Уравнение на с. ф. и с. з. бозонного оператора \hat{a}^+ не имеет ни одного решения. У фермионных же операторов \hat{a} , \hat{a}^+ имеется по одной с. ф.: $|0\rangle$ — с. ф. \hat{a} , а $|1\rangle$ — с. ф. \hat{a}^+ , соответствующие им с. з. в обоих случаях равны 0.

Рассмотрим теперь линейный осциллятор и найдем для него вид с. ф. $\Psi_\alpha(x)$ оператора

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x + i\hat{p}) \quad (5)$$

в координатном представлении. Из уравнения $\hat{a}\Psi_\alpha = \alpha\Psi_\alpha$ следует

$$\Psi_\alpha(x) = C \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} \left(x - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha\right)^2\right], \quad (6)$$

что совпадает с в. ф. когерентного состояния, рассмотренной в 6.21, если положить (сравнить с.з. с оператором (5))

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x_0 + ip_0).$$

Далее замечаем, что изменение во времени когерентного состояния для осциллятора происходит таким образом, что его в. ф. в произвольный момент времени t остается с. ф. оператора \hat{a} , но с.з. $\alpha(t)$ зависит от t , причем

$$\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}. \quad (7)$$

Это обстоятельство очевидно в гейзенберговском представлении, в котором $\hat{a}(t) = e^{-i\omega t} \hat{a}$ (сравнить с 6.25), а в. ф. Ψ_α от времени не зависит. Оно также следует из установленного выше разложения $|\alpha\rangle = \sum c_n |n\rangle$, если учесть, что для осциллятора

$$|n, t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right),$$

и воспользоваться соотношением (2) для коэффициентов разложения.

10.16. Для фермионных операторов $(\hat{a}')^2 = 2\alpha\hat{a} + \alpha^2 \neq 0$ (при $\alpha \neq 0$) и рассматриваемое преобразование не является унитарным.

Для бозонных же операторов по-прежнему $[\hat{a}', \hat{a}'^+] = 1$ и преобразование является унитарным. Имея в виду результат 6.19, легко найти явный вид унитарного оператора

$$\hat{U} = \exp(\alpha^* \hat{a} - \alpha \hat{a}^+), \quad (1)$$

осуществляющего такое преобразование, при этом $\hat{a}' = \hat{U} \hat{a} \hat{U}^+$. Далее, с помощью формулы из условия задачи 1.10 оператор (1) можно записать в виде

$$\hat{U} = e^{-|\alpha|^2/2} e^{-\alpha \hat{a}^+} e^{\alpha^* \hat{a}},$$

после чего легко найти состояние «нового» вакуума в исходном базисе:

$$|0'\rangle = \hat{U} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{-\alpha \hat{a}^+} e^{\alpha^* \hat{a}} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{(-\alpha)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (2)$$

если воспользоваться разложением экспонент с операторами \hat{a} и \hat{a}^+ . Другой способ определения состояния $|0'\rangle$ непосредственно из уравнения $\hat{a}|0'\rangle = 0$ см. в предыдущей задаче; при этом распределение по числу исходных частиц в состоянии $|0'\rangle$, следующее из (2), совпадает, естественно, с выражением (4) (распределением Пуассона) указанной задачи.

10.17. Для фермионных операторов рассматриваемое преобразование является унитарным при выполнении условий

$$(\hat{a}')^2 = (\alpha\hat{a} + \beta\hat{a}^+)^2 = \alpha\beta = 0, \quad \{\hat{a}', \hat{a}'^+\}_+ = \alpha^2 + \beta^2 = 1,$$

т. е. только в тривиальном случае $\alpha = \pm 1$, $\beta = 0$, а также в случае $\alpha = 0$, $\beta = \pm 1$, соответствующем переходу от частиц к дыркам, см. 10.14.

Для бозонных операторов преобразование является унитарным при выполнении условия $\alpha^2 - \beta^2 = 1$. При этом, записав $|0'\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ и поступая как и при решении задачи 10.15, из уравнения $\hat{a}'|0'\rangle = 0$ можно найти

$$c_{2k} = \left(-\frac{\beta}{\alpha}\right)^k \sqrt{\frac{(2k-1)!!}{2^k k!}} c_0 \quad (1)$$

и $c_n = 0$ для нечетных значений n . Из условия нормировки $\langle 0'|0'\rangle = 1$ получаем $|c_0|^2 = |\alpha|^{-1}$; распределение по числу исходных частиц в состоянии «нового» вакуума есть $w_n = |c_n|^2$.

10.18. Рассматриваемое соотношение между векторами состояний

$$|1\rangle = \sum_n C_{f_n} \hat{a}_{f_n}^+ |0\rangle \quad (1)$$

эквивалентно разложению³⁾ $\Psi = \sum_f C_f \Psi_f$ волновой функции Ψ произвольного одночастичного состояния по полной системе собственных функций Ψ_f . Поэтому C_f является в.ф. рассматриваемого состояния в f -представлении.

Так как оператор $\Psi^+(\mathbf{r})$ «рождает» частицу в точке \mathbf{r} , то $\varphi(\mathbf{r})$ (см. условие) является в.ф. (обычной Ψ -функцией) состояния частицы в координатном представлении ($f \equiv \mathbf{r}$). Естественно, что вычисление среднего значения любой аддитивной физической величины, оператор которой в представлении чисел заполнения определяется выражением (X.3), в рассматриваемом состоянии приводит к обычной квантовомеханической формуле (I.5) для средних значений:

$$\bar{F} = \langle 1 | \hat{F} | 1 \rangle = \int \varphi^*(\mathbf{r}) \hat{f} \varphi(\mathbf{r}) dV,$$

а условие нормировки $\langle 1 | 1 \rangle = 1$ принимает вид $\int |\varphi|^2 dV = 1$. Читателю предлагается самостоятельно подтвердить эти соотно-

³⁾ Формальное доказательство этого соотношения состоит в проектировании векторов состояний в (1) на векторы $|\xi\rangle$; при этом $\langle \xi | 1 \rangle = \Psi(\xi)$, $\langle \xi | \hat{a}_f^+ | 0 \rangle = \Psi_f(\xi)$.

шения, воспользовавшись общими свойствами операторов рождения и уничтожения, сравнить с решением задачи 10.23.

10.19. Операторы связаны линейными соотношениями

$$\hat{a}_{f_i}^+ = \sum_k C(f_i, g_k) \hat{a}_{g_k}^+, \quad \hat{a}_{f_i} = \sum_k C^*(f_i, g_k) \hat{a}_{g_k}. \quad (1)$$

Для определения $C(f_i, g_k)$ подействуем на вакуумное состояние:

$$\hat{a}_{f_i}^+ |0\rangle = \sum_k C(f_i, g_k) \hat{a}_{g_k}^+ |0\rangle.$$

Это равенство эквивалентно соотношению между собственными функциями

$$\Psi_{f_i} = \sum_k C(f_i, g_k) \Psi_{g_k}, \quad (2)$$

сравнить с предыдущей задачей. Отсюда следует, что

$$C(f_i, g_k) = \int \Psi_{g_k}^* \Psi_{f_i} d\xi,$$

так что $C(f_i, g_k)$ является с. ф. Ψ_{f_i} в g -представлении.

10.20. Если $f_1 \neq f_2$, то вектор состояния $|2\rangle = \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ |0\rangle$ нормирован на единицу; действительно:

$$\begin{aligned} \langle 2 | 2 \rangle &= \langle 0 | \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{a}_2 (1 \pm \hat{a}_1^+ \hat{a}_1) \hat{a}_2^+ | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | 1 \pm \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 \pm \hat{a}_2 \hat{a}_1^+ (\pm \hat{a}_2^+ \hat{a}_1) | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1 \end{aligned}$$

(знаки $+$ и $-$ соответствуют бозонам и фермионам).

В случае $f_1 = f_2 = f$ нормированное двухбозонное состояние имеет вид

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_f^+)^2 |0\rangle,$$

а аналогичного двухфермионного состояния не существует.

Волновые функции рассматриваемых двухчастичных состояний в координатном представлении имеют вид

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(\xi_1) \psi_2(\xi_2) \pm \psi_2(\xi_1) \psi_1(\xi_2) \}, \quad f_1 \neq f_2;$$

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \psi_f(\xi_1) \psi_f(\xi_2), \quad f_1 = f_2 \equiv f.$$

10.21. В случае различных значений всех трех квантовых чисел f_a для указанного в условии вектора состояний имеем $\langle 3 | 3 \rangle = 1$ (как для бозонов, так и для фермионов). При этом в. ф. системы в координатном представлении описываются формулой (3) из 10.3.

Если все три f_a — одинаковые, то для сохранения нормировки следует ввести множитель $1/\sqrt{3!} = 1/\sqrt{6}$; в. ф. соответствующего трехбозонного состояния $\Psi = \psi_f(\xi_1)\psi_f(\xi_2)\psi_f(\xi_3)$. Если же совпадают лишь два значения квантовых чисел f_a , то нормировочный коэффициент в векторе состояний следует взять равным $1/\sqrt{2}$, а соответствующая в. ф. описывается формулой (1) из 10.3.

10.22. Плотности числа частиц с данным значением s_z проекции спина в точке \mathbf{r} пространства сопоставляется оператор

$$\hat{n}(\mathbf{r}, s_z) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \delta_{\sigma_a, s_z} \delta_{\sigma'_a, s_z} \quad (1)$$

(сравнить с 10.11; оператор записан в координатном представлении для орбитальных переменных и в s_z -представлении — для спиновых). Он является суммой одночастичных операторов (плотность частиц — аддитивная величина), так что его вид в представлении чисел заполнения определяется формулой (X.3), согласно которой получаем

$$\hat{n}(\mathbf{r}, s_z) = \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, s_z) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, s_z), \quad \hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{s_z} \hat{n}(\mathbf{r}, s_z), \quad (2)$$

здесь $\hat{n}(\mathbf{r})$ — оператор плотности частиц уже безотносительно к значению их проекции спина. Операторы $\hat{N}(v, s_z)$ и $\hat{N}(v)$ получаются из \hat{n} интегрированием по соответствующему объему v ; в связи с данной задачей см. также 10.28—31.

10.23. Оператор $\hat{\mathbf{P}}$ импульса (аддитивной физической величины) системы тождественных частиц согласно формуле (X.3) имеет вид

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \int \hat{\Psi}^+(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \Psi(\xi') d\xi'.$$

Используя коммутационные соотношения для бозонных Ψ -операторов

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(\xi), \hat{\Psi}(\xi')] &= [\hat{\Psi}^+(\xi), \hat{\Psi}^+(\xi')] = 0; \\ [\hat{\Psi}(\xi), \hat{\Psi}^+(\xi')] &= \delta(\xi - \xi'), \end{aligned}$$

легко находим

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\Psi}(\xi)] &= \hat{\mathbf{P}}\hat{\Psi}(\xi) - \hat{\Psi}(\xi)\hat{\mathbf{P}} = \\ &= -i\hbar \int \hat{\Psi}^+(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \hat{\Psi}(\xi') d\xi' \hat{\Psi}(\xi) + \\ &+ i\hbar \hat{\Psi}(\xi) \int \hat{\Psi}^+(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \hat{\Psi}(\xi') d\xi' = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -i\hbar \int \left\{ \hat{\Psi}^+(\xi') \hat{\Psi}(\xi) - \hat{\Psi}(\xi) \Psi^+(\xi') \right\} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \hat{\Psi}(\xi') d\xi' = \\
&= i\hbar \int \delta(\xi - \xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \hat{\Psi}(\xi') d\xi' = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{\Psi}(\xi). \quad (1)
\end{aligned}$$

Аналогично получаем

$$[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\Psi}^+(\xi)] = -i\hbar \int \hat{\Psi}^+(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \delta(\xi - \xi') d\xi' = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{\Psi}^+(\xi). \quad (2)$$

Теперь нетрудно заметить, что замена коммутационных соотношений для бозонных Ψ -операторов на антикоммутиационные для фермионных не изменяет полученных результатов.

10.24. Гамильтониан поперечного движения частицы в магнитном поле имеет вид (см. 7.1)

$$\hat{H}_t = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + m^2 \omega^2 (x^2 + y^2)] - \frac{e}{|e|} \hbar \omega \hat{l}_z, \quad \hbar \hat{l}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x, \quad (1)$$

где $\omega = |e| \mathcal{H} / 2mc$. Его, введя обычным образом операторы уничтожения и рождения «квантов колебаний» вдоль осей x и y :

$$\hat{a}_x = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega x + i\hat{p}_x), \quad \hat{a}_y = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega y + i\hat{p}_y),$$

можно преобразовать к виду

$$\hat{H}_t = \hbar\omega \left\{ \hat{a}_x^+ \hat{a}_x + \hat{a}_y^+ \hat{a}_y + 1 + i \frac{e}{|e|} (\hat{a}_y \hat{a}_x^+ - \hat{a}_y^+ \hat{a}_x) \right\}. \quad (2)$$

Вместо операторов $\hat{a}_{x,y}$ удобно ввести их линейные комбинации

$$\hat{a}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_x + i \frac{e}{|e|} \hat{a}_y \right), \quad \hat{a}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_x - i \frac{e}{|e|} \hat{a}_y \right), \quad (3)$$

также являющиеся операторами уничтожения (причем независимыми), так как для них

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_k^+] = \delta_{ik}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_k] = [\hat{a}_i^+, \hat{a}_k^+] = 0; \quad i, k = 1, 2.$$

Теперь имеем ($\omega_H = 2\omega$):

$$\hat{H}_t = \hbar\omega_H \left(\hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + \frac{1}{2} \right), \quad \hat{l}_z = \frac{e}{|e|} (\hat{a}_2^+ \hat{a}_2 - \hat{a}_1^+ \hat{a}_1). \quad (4)$$

Так как эти операторы выражаются только через операторы чисел «квантов» $\hat{n}_{1,2}$, то собственные векторы $|n_1, n_2\rangle$ последних являются также собственными векторами гамильтониана \hat{H}_t и

оператора \hat{l}_z . Отсюда сразу следует выражение для спектра уровней Ландау

$$E_{l, n_1} = \hbar\omega_H \left(n_1 + \frac{1}{2} \right)$$

и их бесконечная кратность вырождения, так как они не зависят от n_2 , при этом $l_z = (n_2 - n_1)e/|e|$, сравнить с 7.1.

Покажем, как можно найти вид с. ф. $\Psi_{n_1 n_2}$ в координатном представлении. Сначала получим в. ф. Ψ_{00} «вакуумного» состояния. Из решения уравнений $\hat{a}_1 \Psi_{00} = 0$ и $\hat{a}_2 \Psi_{00} = 0$ имеем

$$\Psi_{00} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{1}{2\Delta^2}(x^2 + y^2)\right), \quad \Delta^2 = \frac{\hbar}{m\omega}. \quad (5)$$

Волновые функции

$$\Psi_{n_1 n_2} = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2!}} (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \Psi_{00}$$

получаются из Ψ_{00} дифференцированием. При этом вместо x, y удобно ввести переменные

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}\Delta}(x + iy), \quad \xi^* = \frac{1}{\sqrt{2}\Delta}(x - iy).$$

В случае $e > 0$ находим

$$\Psi_{n_1 n_2} = \left[\frac{2^{n_2 - n_1} m\omega}{\pi\hbar (n_1!) (n_2!)} \right]^{1/2} (\xi^* - \frac{\partial}{\partial \xi})^{n_1} \xi^{n_2} e^{-\xi^* \xi}, \quad (6)$$

для $e < 0$ с. ф. получаются комплексным сопряжением (6).

10.25. Гамильтониан плоского осциллятора имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y$, где $\hat{H}_{x, y}$ — гамильтонианы линейных осцилляторов. Коммутативность $\hat{H}_{x, y}$ друг с другом и с гамильтонианом \hat{H} позволяет сразу найти спектр последнего

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right); \quad n_{1, 2} = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

и его с. ф. в виде произведения осцилляторных волновых функций, сравнить с 2.48. Для несоизмеримых частот уровни осциллятора — невырожденные.

В случае кратных частот появляется дополнительная симметрия гамильтониана⁴), проявляющаяся в существовании но-

⁴) В классической физике такая симметрия проявляется в том, что траектории плоского осциллятора становятся замкнутыми кривыми.

вых операторов, коммутирующих с \hat{H} (и не коммутирующих с $\hat{H}_{x,y}$), и объясняющая вырождение уровней. При этом операторы симметрии, действуя на собственные функции гамильтониана, отвечающие данному уровню, преобразуют их друг через друга. Характер такой симметрии особенно нагляден в случае совпадения частот, $\omega_1 = \omega_2$ (т. е. для изотропного осциллятора) и состоит в инвариантности гамильтониана относительно поворотов системы координат, приводящей к сохранению компоненты момента \hat{l}_z .

Учитывая сказанное и вид энергетического спектра (1), операторы симметрии легко связать с операторами рождения и уничтожения «квантов колебаний» вдоль осей x и y . В случае соотношения между частотами $k\omega_1 = s\omega_2$, где k, s — целые числа, такие «дополнительные» операторы симметрии, как легко сообразить, могут быть выбраны в виде

$$\hat{Q} = (\hat{a}_x^+)^k (\hat{a}_y)^s, \quad \hat{Q}^+ = (\hat{a}_x)^k (\hat{a}_y^+)^s. \quad (2)$$

При этом эрмитовы комбинации таких операторов

$$\hat{Q}_1 = \hat{Q} + \hat{Q}^+, \quad \hat{Q}_2 = i(\hat{Q} - \hat{Q}^+) \quad (3)$$

являются операторами сохраняющихся физических величин — интегралов движения рассматриваемой системы. В частности, в случае $\omega_1 = \omega_2$ (когда $k = s = 1$) имеем (выражение для \hat{a} см., например, в 10.15):

$$- \hat{l}_z = i(\hat{Q} - \hat{Q}^+), \quad \hat{p}_x \hat{p}_y + m^2 \omega^2 x y = m \hbar \omega (\hat{Q} + \hat{Q}^+). \quad (4)$$

Сохранение l_z для изотропного осциллятора не требует комментария. Появление же второго интеграла движения в (4) отражает специфическую особенность изотропного осциллятора, переменные в гамильтониане которого *разделяются* как в декартовых, так и в полярных координатах; сравнить с 4.4 и 4.5 для сферического осциллятора.

10.26. Так как для рассматриваемой системы энергетический спектр $E_N = \hbar \omega (n_B + n_F)$ зависит только от общего числа частиц $N = n_B + n_F$, то, очевидно, операторы

$$\hat{Q} = q \hat{b}^+ \hat{f}, \quad \hat{Q}^+ = q \hat{b} \hat{f}^+, \quad \text{при этом} \quad \hat{Q}^2 = (\hat{Q}^+)^2 = 0 \quad (1)$$

(q — вещественный параметр, удобно выбрать $q = \sqrt{\hbar \omega}$), «замещающие» фермион на бозон — \hat{Q} и, наоборот, бозон на фермион — \hat{Q}^+ , коммутируют с гамильтонианом и являются операторами симметрии рассматриваемой системы (сравнить с предыдущей задачей).

Важное свойство рассматриваемой симметрии состоит в том, что гамильтониан системы \hat{H} сам выражается через операторы

симметрии и совпадает с их антикоммутатором, так что⁵⁾

$$\{\hat{Q}, \hat{Q}^+\} = \hat{Q}\hat{Q}^+ + \hat{Q}^+\hat{Q} = \hat{H}, \quad \{\hat{Q}, \hat{Q}\} = \{\hat{Q}^+, \hat{Q}^+\} = 0, \\ [\hat{H}, \hat{Q}] = [\hat{H}, \hat{Q}^+] = 0. \quad (2)$$

Если вместо операторов \hat{Q}, \hat{Q}^+ ввести их эрмитовы комбинации

$$\hat{Q}_1 = \hat{Q} + \hat{Q}^+, \quad \hat{Q}_2 = i(\hat{Q} - \hat{Q}^+),$$

то соотношения (2) принимают более компактный вид:

$$\{\hat{Q}_i, \hat{Q}_k\} = 2\delta_{ik}\hat{H}, \quad [\hat{Q}_i, \hat{H}] = 0; \quad i, k = 1, 2. \quad (3)$$

Появление в (2), (3) наряду с коммутаторами также и антикоммутаторов, через которые выражается гамильтониан системы, — характерное свойство суперсимметрии. При этом только из алгебры операторов (2) (или (3)) следует ряд заключений относительно спектра гамильтониана (без конкретизации вида операторов \hat{Q}, \hat{Q}^+ и \hat{H} !). Перечислим их.

1) Неотрицательность с.з. гамильтониана, т. е. $E \geq 0$. Действительно, в любом состоянии средние значения $\overline{\hat{Q}\hat{Q}^+} \geq 0$ и $\overline{\hat{Q}^+\hat{Q}} \geq 0$ (сравнить с 1.15), так что $\overline{\hat{H}} \geq 0$, а соответственно и $E \geq 0$.

2) Двукратное вырождение уровней с $E \neq 0$. Сначала заметим, что эрмитов оператор $\hat{S} = \hat{Q}^+\hat{Q}$ коммутирует с гамильтонианом, так что существует полная система функций Ψ_{ES} , являющихся собственными функциями \hat{H} и \hat{S} одновременно. Далее, из уравнения $\hat{S}\Psi_{ES} = S\Psi_{ES}$, ввиду равенства $(\hat{Q}^+)^2 = 0$, следует $\hat{S}\hat{Q}^+\Psi_{ES} = 0$. Отсюда либо с.з. $S=0$, либо $\hat{Q}^+\Psi_{ES} = 0$; но во втором случае из уравнения $\hat{H}\Psi_{ES} = E\Psi_{ES}$ находим, что с.з. $S = E$. Других собственных значений (на состояниях с данным E) у оператора \hat{S} нет. Существенно, что при $E \neq 0$ реализуются оба значения $S_1 = 0$ и $S_2 = E$, а соответствующие им с.ф. переходят друг в друга под действием операторов \hat{Q} и \hat{Q}^+ , что и объясняет двукратное вырождение уровня⁶⁾ с $E \neq 0$. Действительно, пусть $\Psi_{E0} \neq 0$ (при этом $\hat{Q}\Psi_{E0} = 0$), тогда имеем $\Psi_{EE} \propto \hat{Q}^+\Psi_{E0} \neq 0$ (так как $\hat{Q}(\hat{Q}^+\Psi_{E0}) = E\Psi_{E0} \neq 0$); аналогично $\Psi_{E0} \propto \hat{Q}\Psi_{EE}$ (при этом $\hat{Q}^+\Psi_{EE} = 0$).

⁵⁾ Напомним: $[\hat{b}, \hat{b}^+] = 1, \{\hat{f}, \hat{f}^+\} = 1, \hat{f}^2 = (\hat{f}^+)^2 = 0$.

⁶⁾ При этом вырожденные состояния называют *суперпартнерами*. Подчеркнем, что речь идет о вырождении уровней, связанном именно с суперсимметричностью гамильтониана. О возможном «дополнительном» вырождении см., например, в 7.9.

3) Невырожденность уровня⁷⁾ $E = 0$ (если он вообще существует!). Из уравнения $\hat{H}\Psi_0 = 0$ следует, что $\hat{Q}\Psi_0 = 0$ и $\hat{Q}^+\Psi_0 = 0$, так что под действием операторов симметрии \hat{Q} , \hat{Q}^+ нового состояния из Ψ_0 уже не возникает.

Спектр и собственные векторы гамильтониана суперсимметричного осциллятора наглядно иллюстрируют отмеченные общие закономерности. Укажем еще одну, тривиальную реализацию алгебры операторов (2), связанную с выбором $\hat{Q} = \hat{f}$ и $\hat{Q}^+ = \hat{f}^+$, при этом $\hat{H} = 1$. Спектр такого «гамильтониана» состоит из одного «уровня», $E = 1$ (при этом $E > 0!$), являющегося двукратно вырожденным с собственными векторами $|n_F\rangle$, где $n_F = 0$ или 1; уровня с $E = 0$ нет. Более интересные примеры см. в следующей задаче, а также в 7.9.

10.27. Легко убедиться, что в условиях задачи

$$\{\hat{Q}, \hat{Q}^+\} = \hat{H}; \quad [\hat{Q}, \hat{H}] = [\hat{Q}^+, \hat{H}] = 0; \quad \hat{Q}^2 = (\hat{Q}^+)^2 = 0,$$

как это и требуется для суперсимметричной системы. При этом, записав $\hat{A} = \hat{A}_1 + i\hat{A}_2$, где $\hat{A}_{1,2}$ — эрмитовы операторы, преобразуем гамильтониан системы к виду

$$\hat{H} = \hat{A}_1^2 + \hat{A}_2^2 - i[\hat{A}_1, \hat{A}_2](\hat{f}^+\hat{f} - \hat{f}\hat{f}^+). \quad (1)$$

Теперь замечаем, что если выбрать

$$\hat{A}_1 = \frac{1}{\sqrt{2m}} \hat{p}, \quad \hat{A}_2 = W(x),$$

где $W(x)$ — вещественная функция, а операторы \hat{f} , \hat{f}^+ связать со спиновыми операторами: $\hat{f} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ и $\hat{f}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, так что

$$\hat{f}^+\hat{f} - \hat{f}\hat{f}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_z,$$

то гамильтониан (1) принимает вид гамильтониана Паули (VII.1) для одномерного движения частицы со спином $s = 1/2$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(x) - \mu \mathcal{H}(x) \hat{\sigma}_z, \quad (2)$$

⁷⁾ Если состояния с $E = 0$ не существует, то говорят о спонтанном нарушении суперсимметрии.

где⁸⁾

$$U(x) = W^2(x), \quad \mu \mathcal{H}(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x).$$

На основе общих свойств с.з. и с.ф. суперсимметричного гамильтониана, установленных в предыдущей задаче, можно сделать ряд интересных замечаний в отношении спектра обычного одномерного гамильтониана (уже бесспиновой частицы). Действительно, с. ф. $\Psi_{E\sigma}$ гамильтониана (2) и коммутирующего с ним оператора $\hat{\sigma}_z$ имеют вид

$$\Psi_{E,+1} = \begin{pmatrix} \psi_E^+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{E,-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_E^- \end{pmatrix}.$$

При этом из уравнения Шрёдингера, $\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E$, следует

$$\left(\frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U_{\pm}(x) \right) \psi_E^{\pm} = E_{\pm} \psi_E^{\pm}, \quad (3)$$

где

$$U_{\pm}(x) = W^2(x) \mp \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x). \quad (4)$$

Хотя формально уравнения (3) являются у.Ш. для одномерного движения в двух различных потенциалах $U_{\pm}(x)$, на основе суперсимметричности гамильтониана (2) следует вывод о совпадении дискретных спектров уровней⁹⁾ E_{\pm} , за исключением, быть может, одного уровня $E_0 = 0$, который может существовать только в одном из этих полей. Такое заключение основано на том, что функции $\Psi_{E\sigma}$ совпадают с введенными в предыдущей задаче функциями Ψ_{ES} , причем, как легко заметить, $S = (1 \pm \sigma)E/2$. Учитывая отмеченную ранее связь с.ф. Ψ_{ES} для различных значений S , находим соотношения для с.ф. $\psi_E^{\pm}(x)$ из (3) (для состояний с $E_+ = E_-$):

$$\psi_E^{\pm}(x) \propto \left(\frac{1}{\sqrt{2m}} \hat{p} \mp iW(x) \right) \psi_E^{\mp}(x). \quad (5)$$

⁸⁾ То обстоятельство, что одна и та же функция $W(x)$ (так называемый *суперпотенциал*) описывает как не зависящую от спина часть взаимодействия (аналог взаимодействия бозонов с бозонами), так и зависящую от спина часть (аналог взаимодействия фермионов с бозонами), приводит к важным последствиям в суперсимметричной квантовой теории поля (*сокращению расходимостей*).

⁹⁾ Так как $E_{\pm} \geq 0$, то существование состояний дискретного спектра предполагает, что пределы $U_{\pm}(x) \rightarrow C_{\pm} > 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$ (так что при этом $\lim W(x) \neq 0$). Если $W(x)$ — четная функция, то потенциалы $U_{\pm}(x)$ получаются друг из друга зеркальным отражением и совпадение спектров, $E_+ = E_-$, очевидно; при этом уровня $E_0 = 0$ не существует.

Отмеченное для уравнений (3) совпадение уровней, $E_+ = E_-$, позволяет в ряде случаев найти спектр чисто алгебраическим способом, вообще не прибегая к решению уравнения Шрёдингера. Так, рассмотрим осциллятор с $U = m\omega^2 x^2/2$ и обозначим его спектр как E_n . Выберем теперь суперпотенциал

$$W = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} x, \quad \text{при этом} \quad U_{\pm} = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \mp \frac{1}{2} \hbar\omega, \quad (6)$$

а соответствующие спектры $E_n^{\pm} = E_n \mp \hbar\omega/2$. Различие их означает, что в одном из них (очевидно среди E^+) реализуется значение $E_0^+ = 0$, а совпадение остальных уровней означает, что $E_{n+1}^+ = E_n^-$. Отсюда следует $E_0 = \hbar\omega/2$ и $E_{n+1} = E_n + \hbar\omega$, что сразу воспроизводит спектр линейного осциллятора $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Читателю предлагается аналогичным образом найти спектр в поле $U = -U_0 \operatorname{ch}^{-2}(x/a)$, выбрав суперпотенциал $W \propto \operatorname{th}(x/a)$, и сравнить с результатом решения уравнения Шрёдингера, см. [1, § 23].

Обсудим вопрос о возможности существования связанного состояния с энергией $E_0 = 0$. Для него из уравнения $\hat{H}\Psi_0 = 0$ следует, что

$$\hat{Q}\Psi_0 = 0, \quad \hat{Q}^+\Psi_0 = 0$$

(сравнить с предыдущей задачей); отсюда в приложении к гамильтониану (2) получаем

$$\left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} \pm iW(x) \right) \psi_0^{\mp}(x) = 0, \quad \psi_0^{\mp} = B^{\mp} \exp\left(\pm \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^x W dx \right).$$

Имея в виду, что $W(\pm\infty) \neq 0$ (см. подстрочное примечание), замечаем, что одна из функций ψ_0^{\pm} заведомо возрастает на больших расстояниях и для нее следует выбрать $B = 0$ (в согласии с общим результатом о невырожденности уровня с $E = 0$). Для другой из них возможность выполнения граничных условий $\psi_0(\pm\infty) = 0$, а тем самым и существования состояния Ψ_0 определяется только лишь различием знака (!) суперпотенциала при $x \rightarrow \pm\infty$. Если $W(+\infty) > 0$, а $W(-\infty) < 0$, то состояние с $E_0 = 0$ существует и реализуется при значении $\sigma = +1$; при изменении знаков $W(\pm\infty)$ ему отвечает уже $\sigma = -1$. Если же знаки суперпотенциала при $x \rightarrow \pm\infty$ одинаковые, то состояния с $E_0 = 0$ не существует. Так, для $W(x) = W_0 = \operatorname{const}$ в уравнениях (3) имеем $U_{\pm} = W_0^2 = \operatorname{const} > 0$ и отсутствие состояния с $E_0 = 0$ очевидно. В случае $W(x) =$

$= W_0 x / |x|$ уже

$$U_{\pm}(x) = W_0^2 \mp \alpha \delta(x), \quad \alpha = \sqrt{\frac{2}{m}} \hbar W_0$$

и существование состояния с $E^0 = 0$ очевидным образом связано с наличием единственного дискретного уровня в δ -яме, см. 2.7.

В заключение рекомендуем читателю вопрос о связи энергетических спектров частицы в потенциалах $U_{\pm}(x)$ (4) обсудить в квазиклассическом приближении на основе правила квантования Бора — Зоммерфельда (при этом слагаемые $\mp \hbar W' / \sqrt{2m} \propto \hbar$ в потенциалах рассматривать как возмущение).

10.28. Выразив в операторе плотности числа частиц $\hat{n}(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r})$ (см. 10.22) $\Psi(\mathbf{r})$ -операторы через операторы уничтожения $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ и рождения $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ частицы с данным импульсом $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ (при этом $\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}} / \sqrt{V}$), находим

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2}. \quad (1)$$

Средняя плотность числа частиц $\bar{n}(\mathbf{r})$ получается усреднением оператора (1) по основному состоянию бозе-газа $|\Psi_0\rangle = |N_{\mathbf{k}=0}, 0_{\mathbf{k}\neq 0}\rangle$ (все частицы имеют импульс $\mathbf{p} = 0$). Так как при этом

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} | \Psi_0 \rangle = \begin{cases} N, & \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = 0, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

то для \bar{n} имеем естественный результат $\bar{n} = N/V$.

Среднее число частиц в объеме v получается усреднением оператора $\hat{N}(v) = \int_v \hat{n}(\mathbf{r}) d^3r$ и равно $\overline{N(v)} = Nv/V$.

Для расчета флуктуации числа частиц усредним сначала оператор $\overline{\hat{N}^2(v)}$ по состоянию $|\Psi_0\rangle$. Так как

$$\begin{aligned} \hat{N}^2(v) &= \\ &= \frac{1}{V^2} \int_v \int_v \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \exp\{i[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\mathbf{r} + (\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3)\mathbf{r}']\} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4} d^3r d^3r', \end{aligned}$$

то для вычисления $\overline{\hat{N}^2(v)}$ прежде всего найдем значения матричных элементов

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4} | \Psi_0 \rangle.$$

Используя вид $|\Psi_0\rangle$, замечаем, что они отличны от нуля лишь при выполнении условий $k_1 = k_4 = 0$, $k_2 = k_3$ и равны N^2 для $k_2 = k_3 = 0$ и N — для $k_2 = k_3 \equiv k \neq 0$. С учетом этого получаем

$$\overline{N^2(v)} = \frac{1}{V^2} \int_v \int_v \left\{ N^2 + N \sum_{k \neq 0} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \right\} d^3r d^3r'. \quad (2)$$

Ввиду полноты системы функций $\Psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}/\sqrt{V}$ сумма здесь равна $V\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - 1$ и элементарное интегрирование дает

$$\overline{N^2(v)} = \left(\frac{Nv}{V}\right)^2 + \frac{Nv}{V} - \frac{Nv^2}{V^2}. \quad (3)$$

Соответственно

$$\overline{(\Delta N(v))^2} = \overline{N^2(v)} - \overline{N(v)}^2 = \frac{Nv}{V} \left(1 - \frac{v}{V}\right). \quad (4)$$

При $v = V$ имеем $\overline{(\Delta N(V))^2} = 0$ — очевидный результат, так как полное число частиц в системе равно N и не флуктуирует. В случае $v \ll V$ согласно (4) имеем

$$\overline{(\Delta N(v))^2} \approx Nv/V = \overline{N(v)}.$$

Отметим, что для системы из N невзаимодействующих классических частиц, находящихся в объеме V , распределение по числу частиц N_v в объеме v имеет вид

$$W(N_v) = \frac{N!}{N_v!(N-N_v)!} \left(\frac{v}{V}\right)^{N_v} \left(1 - \frac{v}{V}\right)^{N-N_v}$$

(биномиальное распределение). Вычисление для такого распределения средних значений $\overline{N_v}$, $\overline{N_v^2}$, $\overline{(\Delta N_v)^2}$ приводит к результатам, совпадающим с полученными выше (см. по этому поводу замечание, сделанное в следующей задаче).

10.29. Так как операторы плотности числа частиц в различных точках пространства коммутируют друг с другом, то оператор величины $n_1 n_2$ имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{n}_1 \hat{n}_2 &= \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) = \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \exp\{i[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\mathbf{r}_1 + (\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3)\mathbf{r}_2]\} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4} \end{aligned}$$

и его среднее значение в основном состоянии бозе-газа

$$\overline{n_1 n_2} = \frac{1}{V^2} \left\{ N^2 + N \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \right\} = \frac{N}{V} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{N^2}{V^2} - \frac{N}{V^2}, \quad (1)$$

сравнить с выводом формул (2), (3) в предыдущей задаче. Таким образом ¹⁰⁾,

$$\frac{1}{\bar{n}} \{\overline{n_1 n_2} - \bar{n}^2\} = \delta(\mathbf{r}) - \frac{\bar{n}}{N}$$

и корреляционная функция оказывается равной

$$\nu = -\bar{n}/N. \quad (2)$$

Чтобы лучше понять полученные результаты, найдем аналогичные (1), (2) характеристики для случая невзаимодействующих классических частиц. Учитывая, что при этом распределение координат частиц системы описывается произведением вероятностей d^3r_a/V и $n(\mathbf{r}) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)$, легко находим

$$\begin{aligned} \overline{n(\mathbf{r}'_1) n(\mathbf{r}'_2)} &= \int \dots \int \sum_{a, b} \delta(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_a) \delta(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_b) \frac{d^3r_1}{V} \dots \frac{d^3r_N}{V} = \\ &= \frac{N}{V} \delta(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) + \frac{N(N-1)}{V^2}, \quad (3) \end{aligned}$$

что совпадает с (1) (заметим, что слагаемое с δ -функцией в (3) отвечает членам суммы с $a = b$, их число N ; второе слагаемое — от членов с $a \neq b$, их число $N(N-1)$).

Конечно, для макроскопических систем значение N огромно, так что последнее слагаемое в (1) пренебрежимо мало и соответственно в (2) имеем $\nu = 0$ (корреляция отсутствует). С другой стороны, для конечных значений N уже $\nu \neq 0$. При этом характерные свойства ν : независимость от \mathbf{r} и ее знак $\nu < 0$, имеют простое объяснение для классических частиц. Действительно, значение $\overline{n_1 n_2}$ меньше чем \bar{n}^2 по той причине, что одна и та же частица не может вносить вклад в плотность одновременно в различных точках пространства, независимо от расстояния между ними (в случае $N \gg 1$ плотность в разных точках пространства определяется в основном вкладом различных частиц).

Характеристики бозе-газа в основном состоянии, рассмотренные в данной и предыдущей задачах, оказались такими же, как для газа классических частиц. Это не случайно. Действительно, волновая функция основного состояния имеет вид

$$\Psi_0 = \psi_0(\mathbf{r}_1) \psi_0(\mathbf{r}_2) \dots \psi_0(\mathbf{r}_N), \quad \psi_0(\mathbf{r}) = 1/\sqrt{V},$$

¹⁰⁾ Слагаемое с δ -функцией, обращающееся в нуль при $\mathbf{r} \neq 0$, носит универсальный характер и вообще не зависит от вида функции распределения.

т. е. представляет произведение в. ф. отдельных частиц, как и в случае различных частиц. Соответственно частицы не интерферируют друг с другом, а для каждой из них $|\psi_0|^2 = 1/V$, что соответствует равновероятному распределению их по объему.

10.30. Оператор плотности числа частиц $\hat{n}(\mathbf{r})$ имеет вид

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \hat{n}(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{1}{V} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma}, \quad (1)$$

сравнить с 10.28 и 10.22, $\sigma \equiv s_z$. Основное состояние ферми-газа определяется числами заполнения $n_{\mathbf{k}\sigma}$, равными 1 для $|\mathbf{k}| < k_F$ и 0 для $|\mathbf{k}| > k_F$, так что для него

$$|\Psi_0\rangle = \prod \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ |0\rangle, \quad (2)$$

где произведение включает операторы $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+$ с квантовыми числами $(\mathbf{k}\sigma)$ заполненных состояний. При этом импульс Ферми, $p_F = \hbar k_F$, находится из условия

$$\sum_{\sigma} \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ (k < k_F)}} 1 = (2s + 1) \int_{k < k_F} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{(2s + 1) V k_F^3}{6\pi^2} = N, \quad (3)$$

т. е. для него

$$k_F = [6\pi^2 N / (2s + 1) V]^{1/3}.$$

Замечая, что матричный элемент $\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma} | \Psi_0 \rangle$ отличен от нуля (и равен при этом 1) лишь для $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 \equiv \mathbf{k}$, причем $|\mathbf{k}| \leq k_F$, по формулам (1), (2) получаем

$$\bar{n} = \langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle = N/V$$

(что и следовало ожидать); наконец, $\bar{n}(\sigma) = \bar{n}/(2s + 1)$, а $\overline{N(v)} = \bar{n}v = Nv/V$.

10.31. Оператор величины $n(\mathbf{r}_1, \sigma_1) n(\mathbf{r}_2, \sigma_2)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{n}(\xi_1) \hat{n}(\xi_2) &= \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\{k_a\}} \exp \{i[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \mathbf{r}_1 + (\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \mathbf{r}_2]\} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_3 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4 \sigma_2} \end{aligned} \quad (1)$$

(сравнить с 10.29 и 10.31). Легко сообразить, что получающийся при усреднении матричный элемент

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_3 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4 \sigma_2} | \Psi_0 \rangle, \quad (2)$$

где $|\Psi_0\rangle$ — указанная в предыдущей задаче в. ф. основного состояния ферми-газа, в случае $\sigma_1 \neq \sigma_2$ отличен от нуля (и равен

при этом 1) лишь для значений $k_1 = k_2$, $k_3 = k_4$, причем $|k_{1,3}| \leq k_F$. Учитывая это, для $\sigma_1 \neq \sigma_2$ находим

$$\langle \Psi_0 | \hat{n}(\xi_1) \hat{n}(\xi_2) | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{V^2} \sum_{|k_{1,2}| \leq k_F} 1 = \frac{\bar{n}^2}{(2s+1)^2}, \quad \bar{n} = \frac{N}{V} \quad (3)$$

(вычисление сумм по $k_{1,2}$ см. в предыдущей задаче). Так как $\bar{n}(\sigma) = \bar{n}/(2s+1)$, то полученный результат (3) означает, что $\overline{n_1 n_2} = \bar{n}_1 \cdot \bar{n}_2$, т. е. в случае различных значений проекций спина, $\sigma_1 \neq \sigma_2$, между плотностями частиц в различных точках нет корреляции.

В случае $\sigma_1 = \sigma_2$ ситуация иная. Теперь матричный элемент (2) отличен от нуля, и равен 1 в следующих случаях:

- 1) $k_1 = k_2$, $|k_2| \leq k_F$; $k_3 = k_4$, $|k_4| \leq k_F$;
- 2) $k_1 = k_4$, $|k_4| \leq k_F$; $k_2 = k_3$, $|k_3| > k_F$.

Учитывая это обстоятельство, находим

$$\overline{n(\mathbf{r}_1, \sigma) n(\mathbf{r}_2, \sigma)} = \frac{1}{V^2} \left\{ \sum_{|k_{1,2}| \leq k_F} 1 + \sum_{|k_1| \leq k_F} \sum_{|k_2| \geq k_F} e^{i(k_2 - k_1)(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \right\}. \quad (4)$$

Далее, воспользовавшись соотношением

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{|k| \geq k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= \frac{1}{V} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \sum_{|k| < k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right\} = \\ &= \delta(\mathbf{r}) - \frac{1}{V} \sum_{|k| < k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \end{aligned}$$

и вычислив интеграл (в сферических координатах с полярной осью, направленной вдоль вектора \mathbf{r}):

$$\sum_{|k| \leq k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k \leq k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3k = \frac{V}{2\pi^2 r^2} \left\{ \frac{\sin k_F r}{r} - k_F \cos k_F r \right\},$$

приводим выражение (4) к виду ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\bar{n}(\sigma) = \bar{n}/(2s+1)$)

$$\overline{n(\mathbf{r}_1, \sigma) n(\mathbf{r}_2, \sigma)} = \bar{n}(\sigma)^2 - \frac{1}{4\pi^4 r^4} \left\{ \frac{\sin k_F r}{r} - k_F \cos k_F r \right\}^2.$$

Отсюда получаем корреляционную функцию

$$v(r, \sigma) = - \frac{[\sin k_F r - k_F r \cos k_F r]^2}{4\pi^4 \bar{n}(\sigma) r^6}. \quad (5)$$

Обсудим полученные результаты. Характер установленных корреляций плотностей частиц физически весьма нагляден. Тождественные частицы с различными значениями проекции спина ведут себя как различные частицы, и отсутствие корреляций вполне естественно. Знак корреляционной функции $v(r, \sigma) < 0$ в случае одинаковых проекций спина — также естественный результат, отражающий «отталкивательный» характер обменного взаимодействия для фермионов, при этом для значений $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$ корреляция исчезает.

В заключение заметим, что корреляционная функция $v(r)$ плотности числа частиц вообще (безотносительно к значениям проекций спина) совпадает с $v(r, \sigma)$.

10.32. Оператор взаимодействия между частицами в представлении чисел заполнения согласно (X. 4) имеет вид

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \iint \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2) U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) d^3r_1 d^3r_2. \quad (1)$$

Воспользовавшись разложением Ψ -оператора по плоским волнам (оно приведено в 10.28), преобразуем выражение (1) к виду

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}, \quad (2)$$

где матричные элементы потенциала взаимодействия

$$U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2} \int_V \int_V U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \exp\{i[(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)\mathbf{r}_1 + (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4)\mathbf{r}_2]\} d^3r_1 d^3r_2.$$

В первом порядке теории возмущений имеем

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \langle \Psi_0 | \hat{U} | \Psi_0 \rangle, \quad (3)$$

где $|\Psi_0\rangle$ — в. ф. основного состояния системы невзаимодействующих частиц, в котором все частицы имеют импульс $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = 0$. При этом $E_0^{(0)} = 0$, а матричный элемент

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1} | \Psi_0 \rangle$$

отличен от нуля лишь в случае, когда все $\mathbf{k}_a = 0$ и равен $N(N-1) \approx N^2$ (ввиду $N \gg 1$). Поэтому

$$E_0 = U_{00}^{00} N^2 / 2.$$

Так как радиус R потенциала $U(r)$ предполагается, естественно, имеющим микроскопические размеры, так что

$R \ll L \sim V^{1/3}$, то при вычислении интеграла

$$\int_V U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d^3r_2 = \iiint_{-\infty}^{\infty} U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1) d^3r_2 = \int U(r) d^3r \equiv \tilde{U}_0 \quad (3')$$

можно интегрировать по всему пространству и он оказывается не зависящим от \mathbf{r}_1 . В результате получаем $U_{00}^{00} = \tilde{U}_0/V$ и окончательное выражение для энергии

$$E_0 \approx \frac{1}{2} \tilde{U}_0 \frac{N^2}{V} = \frac{1}{2} \bar{n} \tilde{U}_0 N, \quad \bar{n} = N/V. \quad (4)$$

Оно имеет простой смысл, представляя собой произведение \tilde{U}_0/V — средней энергии взаимодействия любой пары частиц друг с другом при их равновероятном распределении по объему ($\omega = 1/V$) на общее число $N^2/2$ пар.

В заключение сделаем следующее замечание. Полученный на основе теории возмущений по потенциалу результат (4) предполагает, что взаимодействие между частицами является достаточно слабым, так что выполняется условие¹¹⁾ $\tilde{U}_0 \ll \hbar^2 R/m$. Однако с помощью теории возмущений по длине рассеяния (см. 4.29, 4.31, 11.4) его легко обобщить на случай сильного отталкивательного¹²⁾ потенциала с малым радиусом действия. Имея в виду отмеченный в 11.4 способ учета короткодействующего потенциала и замечая, что \tilde{U}_0 лишь множителем, $\tilde{U}_0 = 2\pi\hbar^2 a_0/\mu$ ($\mu = m/2$ — приведенная масса частиц), отличается от длины рассеяния a_0 в борновском приближении, можно утверждать, что формула (4) для E_0 , выраженная через точную длину рассеяния a_0 , остается справедливой и в случае сильного короткодействующего потенциала, когда $a_0 \ll (\bar{n})^{-1/3}$; дальнейшее исследование вопроса — см. [28], § 25 (для бозе-газа) и § 6 (для ферми-газа).

10.33. Задача решается аналогично предыдущей. Оператор \mathcal{O} взаимодействия частиц друг с другом определяется приведенными в ней формулами (1), (2), в которых следует только снабдить операторы $\hat{a}_{\mathbf{k}}$, $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ спиновым индексом $\sigma \equiv s_z$ (т. е. заменить $\hat{a}_{\mathbf{k}a}$ на $\hat{a}_{\mathbf{k}a}\sigma_a$ и т. д., а в суммирование по \mathbf{k}_a включить и суммирование по $\sigma_{1,2}$, при этом $\sigma_3 = \sigma_1$ и $\sigma_4 = \sigma_2$).

¹¹⁾ Заметим, что $\tilde{U}_0 \sim U_0 R^3$, где U_0 , R — характерная величина и радиус потенциала парного взаимодействия частиц.

¹²⁾ Именно отталкивательный характер взаимодействия обеспечивает устойчивость газообразной фазы при температуре $T = 0$.

При вычислении поправки $E_0^{(1)} = \langle \Psi_0 | \tilde{U} | \Psi_0 \rangle$ первого порядка к энергии $E_0^{(0)}$ основного состояния ферми-газа в отсутствие взаимодействия следует учесть значения чисел заполнения $n_{\mathbf{k}\sigma}$ в этом состоянии $|\Psi_0\rangle$, равные 1 для $k < k_F$ и 0 для $k > k_F$. При этом легко заметить, что в суммах по k_a при усреднении оператора \tilde{O} (см. формулу (2) из 10.32) все слагаемые, для которых хотя бы одно из k_a больше k_F , обращаются в нуль, так что в $E_0^{(1)}$ входят матричные элементы $U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}$ с $k_a < k_F$. Перейдя к новым переменным

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2,$$

преобразуем рассматриваемый матричный элемент к виду

$$U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2} \int_V U(r) \exp \left[\frac{i}{2} (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \mathbf{r} \right] d^3r \times \\ \times \int \exp [i (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \mathbf{R}] d^3R.$$

Учитывая условие $R_0 \ll V^{1/3}$ для радиуса потенциала $U(r)$, интегрирование по \mathbf{r} можно распространить на все пространство (сравнить с предыдущей задачей) и ввиду предполагаемого неравенства $k_F R_0 \ll 1$ заменить экспоненциальный множитель на 1; при этом получаем

$$U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} \approx \frac{1}{V} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \tilde{U}_0; \quad \tilde{U}_0 = \int U(r) d^3r$$

(множитель $\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}$ отвечает сохранению импульса при взаимодействии частиц), и соответственно

$$E_0^{(1)} = \frac{\tilde{U}_0}{2V} \langle \Psi_0 | \sum_{\sigma_1, 2} \sum_{\{\mathbf{k}_a\}} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_3\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_4\sigma_1} | \Psi_0 \rangle. \quad (1)$$

Основываясь на явном виде в.ф. $|\Psi_0\rangle$, замечаем, что здесь из всех слагаемых отличны от нуля лишь такие, для которых либо $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_2$, либо $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_2$, так что (1) можно преобразовать к виду

$$E_0^{(1)} = \frac{\tilde{U}_0}{2V} \langle \Psi_0 | \sum_{\sigma_1, 2} \sum_{\mathbf{k}_1, 2} (\hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^+ + \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_2}^+) \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1} | \Psi_0 \rangle. \quad (2)$$

Здесь двойная сумма по $\mathbf{k}_{1,2}$ при значениях $\sigma_1 = \sigma_2$ равна нулю, так как для фермионных операторов

$$\hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma}^+ + \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma}^+ = \{\hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma}^+, \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma}^+\} = 0.$$

При $\sigma_1 \neq \sigma_2$ первую часть суммы (2), используя антикоммутиационные свойства операторов \hat{a} , \hat{a}^+ , можно записать в виде

$$\sum'_{\Gamma_1 \sigma_2} \sum_{k_1 k_2} \hat{a}_{k_1 \sigma_1}^+ \hat{a}_{k_2 \sigma_2}^+ \hat{a}_{k_2 \sigma_2} \hat{a}_{k_1 \sigma_1} = \sum'_{\sigma_1, 2} \sum_{k_1, 2} \tilde{n}_{k_2 \sigma_2} \hat{n}_{k_1 \sigma_1}, \quad \sigma_1 \neq \sigma_2, \quad (3)$$

где $\hat{n}_{k, \sigma}$ — операторы чисел заполнения. Так как $\hat{N}(\sigma) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{k\sigma}$ является оператором числа частиц в спиновом состоянии σ , а в основном состоянии эти числа имеют определенные значения, равные $N/2$, то усреднение выражения (3) по состоянию $|\Psi_0\rangle$ дает $2(N/2)^2 = N^2/2$. Вторая же часть суммы в (2) при $\sigma_1 \neq \sigma_2$ отлична от нуля лишь при значениях $k_1 = k_2$ и, как легко заметить, оказывается равной N , т. е. пренебрежимо малой (ввиду $N \gg 1$) по сравнению с первой частью суммы. Таким образом, находим

$$E_0^{(1)} = \frac{1}{4} \tilde{U}_0 \frac{N^2}{V} \quad (4)$$

и энергию основного состояния ферми-газа

$$E_0 \simeq E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \frac{3}{10} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m} N + \frac{1}{4} \tilde{U}_0 \frac{N^2}{V}. \quad (5)$$

Появление дополнительного множителя $1/2$ в выражении для $E_0^{(1)}$ по сравнению со случаем бозе-газа, см. предыдущую задачу, имеет простое объяснение: в рассматриваемом приближении, $k_F R_0 \ll 1$, фермионы с одинаковым значением проекции спина не взаимодействуют друг с другом в силу принципа Паули, сравнить с 10.31.

В заключение заметим, что указанное в предыдущей задаче обобщение результата теории возмущений на случай сильного короткодействующего потенциала справедливо и для ферми-газа.

10.34. Энергия частицы с импульсом \mathbf{p} и проекцией спина s_z на направление магнитного поля равна (для $s = 1/2$):

$$\varepsilon_{\mathbf{p} s_z} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 - 2\mu_0 s_z \mathcal{H}.$$

Обозначим через N_{\pm} числа частиц в основном состоянии ферми-газа, имеющих соответственно $s_z = \pm 1/2$. Так как в основном состоянии энергия системы имеет минимальное значение, то ему отвечают следующие значения чисел заполнения:

$$n_{\mathbf{p}, \pm} = 1 \text{ для } |\mathbf{p}| \leq p_{F, \pm} \text{ и } n_{\mathbf{p}, \pm} = 0 \text{ для } |\mathbf{p}| > p_{F, \pm},$$

причем

$$\frac{1}{2m} p_{F, +}^2 - \mu_0 \mathcal{H} = \frac{1}{2m} p_{F, -}^2 + \mu_0 \mathcal{H}. \quad (1)$$

Это соотношение, означающее равенство максимальных значений энергий заполненных состояний с $s_z = \pm 1/2$, обеспечивает минимальность энергии всей системы в целом.

Выражая обычным образом $p_{F, \pm}$ через N_{\pm} :

$$N_{\pm} = \sum_p n_{p, \pm} = \int_{p < p_{F, \pm}} \frac{V d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V p_{F, \pm}^3}{6\pi^2 \hbar^3},$$

$$p_{F, \pm} = \left(\frac{6\pi^2 \hbar^3 N_{\pm}}{V} \right)^{1/3},$$

находим согласно (1) уравнение для определения N_{\pm} :

$$N_+^{2/3} - N_-^{2/3} = 4m\mu_0 \mathcal{H} \left(\frac{V}{6\pi^2 \hbar^3} \right)^{2/3}, \quad N_+ + N_- = N. \quad (2)$$

При этом магнитный момент газа в целом равен

$$\mathcal{M}_z = \mu_0 (N_+ - N_-), \quad \mathcal{M}_x = \mathcal{M}_y = 0. \quad (3)$$

В отсутствие магнитного поля имеем $N_+ = N_- = N/2$. Соответственно в случае достаточно слабого поля значения N_{\pm} мало отличаются от $N/2$. Записав их в виде $N_{\pm} = N/2 \pm n$ и выполнив после этого в уравнении (2) разложение по малому параметру n/N (используя $(N/2 \pm n)^{2/3} \approx (N/2)^{2/3} (1 \pm 4n/3N)$), находим

$$2n = (N_+ - N_-) = m\mu_0 N \mathcal{H} \left(\frac{\sqrt{3} V}{\pi^2 \hbar^3 N} \right)^{2/3} \quad (4)$$

(условие $n/N \ll 1$ как раз и определяет случай слабого поля).

Согласно (3) и (4) в случае слабого поля имеем

$$\mathcal{M} = \chi_0 V \mathcal{H}, \quad \chi_0 = \frac{3m\mu_0^2}{(3\pi^2 \hbar^3)^{2/3}} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3}. \quad (5)$$

Так как магнитная восприимчивость $\chi_0 > 0$, то рассматриваемый ферми-газ является парамагнетиком.

С увеличением поля значение $|N_+ - N_-|$ монотонно возрастает и при $\mathcal{H} \geq \mathcal{H}_{кр}$, где

$$\mathcal{H}_{кр} = \frac{1}{4m |\mu_0|} \left(\frac{6\pi^2 \hbar^3 N}{V} \right)^{2/3}, \quad (6)$$

спины всех частиц выстраиваются в одном направлении. При этом магнитный момент системы достигает насыщения

$$\mathcal{M} = |\mu_0| N \quad (7)$$

и ориентирован в направлении магнитного поля.

10.35. При температуре $T = 0$ электроны занимают нижние по энергии состояния. При этом электронная плотность $n(r)$,

максимальная кинетическая энергия электронов в точке r , равная $\epsilon_0(r) = p_0^2(r)/2m$, и электростатический потенциал $\varphi(r)$ внутри проводника¹³⁾ связаны соотношениями

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho = -4\pi q \delta(r) + 4\pi e \delta n(r), \quad (1)$$

где

$$\frac{1}{2m} p_0^2(r) - e\varphi(r) = \epsilon_F = \frac{1}{2m} p_F^2 = \text{const}, \quad (2)$$

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3} p_0^3(r), \quad \delta n = n - n_0 = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3} (p_0^3(r) - p_F^3).$$

Здесь $e > 0$ — величина заряда электрона, $\delta n(r)$ — изменение электронной плотности, вызванное внесением заряда q ; соотношение (2) обеспечивает минимальность энергии всей системы электронов, при этом ϵ_F характеризует невозмущенную систему (каковой она остается и при внесении заряда на большом расстоянии от него).

Ввиду предполагаемой малости $|\delta n| \ll n_0$ имеем $|p_0 - p_F| \ll p_F$ и из соотношений (2) получаем

$$e\varphi \approx \frac{1}{m} p_F (p_0(r) - p_F), \quad \delta n = \frac{1}{\pi^2\hbar^3} p_F^2 (p_0(r) - p_F).$$

При этом уравнение (1) принимает вид

$$\Delta\varphi = -4\pi q \delta(r) + \kappa^2\varphi, \quad \kappa = \left(\frac{4me^2 p_F}{\pi\hbar^3} \right)^{1/2}, \quad (3)$$

а его решение¹⁴⁾

$$\varphi(r) = \frac{q}{r} e^{-\kappa r} \quad (4)$$

показывает, что электрическое поле в проводнике экранируется на расстояниях $r \sim \kappa^{-1}$.

10.36. Так как ширина приповерхностной области внутри проводника, в которой распределен заряд (т. е. $\rho \neq 0$), имеет микроскопические размеры, то при рассмотрении поля вблизи поверхности можно пренебречь ее кривизной и ограничиться одномерным случаем. При этом распределение заряда электронов и потенциала вблизи поверхности проводника, которую выбираем как плоскость $z = 0$, описываются уравнением

$$\varphi''(z) = -4\pi\rho(z) = 4\pi e \delta n(z) \simeq \kappa^2\varphi(z), \quad (1)$$

¹³⁾ Рассматриваемые величины сферически-симметричны относительно точки $r = 0$ расположения вносимого заряда q . Подчеркнем, что в отличие от атома теперь $n(r) \rightarrow n_0 \neq 0$ при $r \rightarrow \infty$.

¹⁴⁾ Сравнить, например, с 4.20.

где

$$\kappa = \left(\frac{4me^2 \rho_F}{\pi \hbar^3} \right)^{1/2},$$

сравнить с предыдущей задачей. Решение уравнения, удовлетворяющее граничному условию $\varphi(z) \rightarrow \varphi_0 = 0$ при $z \rightarrow \infty$ (считаем, что области проводника отвечают значения $z > 0$), имеет вид

$$\varphi(z) = Ae^{-\kappa z}, \quad z \geq 0, \quad (2)$$

а объемная плотность заряда

$$\rho(z) = -\frac{\kappa^2}{4\pi} \varphi(z) = -\frac{\kappa^2 A}{4\pi} e^{-\kappa z}, \quad z \geq 0. \quad (3)$$

Значение A определяется «поверхностной» плотностью заряда

$$\sigma_0 = \int_0^{\infty} \rho(z) dz, \quad A = -\frac{4\pi\sigma_0}{\kappa}. \quad (4)$$

Это же значение A следует, естественно, и из граничного условия $E_n(0) = \varphi'(0) = 4\pi\sigma_0$ электростатики проводников.

Г л а в а 11

АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ

11.1. Релятивистская поправка к функции Гамильтона заряженной частицы в электростатическом поле в классической теории согласно формуле ($-e$ — заряд частицы, $p \ll mc$)

$$\mathcal{H} = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - e\varphi(\mathbf{r}) - mc^2 \simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} - e\varphi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

равна $-p^4/8m^3 c^2$. Квантовомеханическим обобщением этой поправки является оператор $\hat{V} = -\hat{p}^4/8m^3 c^2$, рассматриваемый как возмущение гамильтониана. Так как он коммутирует с операторами \hat{l}^2 и \hat{l}_z , то с. ф. $\Psi_{n_r l m}^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана (с $U = -e\varphi = -Ze^2/r$, см. (IV.3)) являются правильными функциями нулевого приближения при наличии возмущения. При этом согласно (VIII.1)

$$\begin{aligned} E_{n_r l}^{(1)} &= \int \Psi_{n_r l m}^{(0)*} \hat{V} \Psi_{n_r l m}^{(0)} d^3 r = -\frac{1}{2mc^2} \langle n_r l m | \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)^2 | n_r l m \rangle = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \langle n_r l m | \left(\hat{H}_0 + \frac{Ze^2}{r} \right) | n_r l m \rangle = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \langle n_r l m | \hat{H}_0^2 + \hat{H}_0 \frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2}{r} \hat{H}_0 + \left(\frac{Ze^2}{r} \right)^2 | n_r l m \rangle, \quad (2) \end{aligned}$$

где \hat{H}_0 — невозмущенный гамильтониан водородоподобного атома.

Так как $\Psi_{n_r l m}^{(0)}$ является с. ф. оператора \hat{H}_0 , то во всех слагаемых последнего из равенств (2) можно \hat{H}_0 заменить¹⁾ его с. з., равным

$$E_{n_r l}^{(0)} = E_n^{(0)} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = n_r + l + 1. \quad (3)$$

После этого расчет поправки первого приближения сводится к вычислению двух матричных элементов

$$\begin{aligned} \langle n_r l m | \frac{Ze^2}{r} | n_r l m \rangle &= -2E_n^{(0)}, \\ \langle n_r l m | \frac{1}{r^2} | n_r l m \rangle &= -\frac{4mE_n^{(0)}}{(2l+1)\hbar^2 n}. \end{aligned} \quad (4)$$

Их значения проще всего получить с помощью соотношения (I.6). Для этого заметим, что (3) можно рассматривать как с. з. оператора

$$\hat{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}.$$

Теперь дифференцирование в соответствии с (I.6) по параметрам Z и l приводит к соотношениям (4).

В результате получаем

$$E_{n_r l}^{(1)} = \left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 \left\{ -\frac{3}{4n^2} + \frac{2}{(2l+1)n} \right\} E_n^{(0)}. \quad (5)$$

Отсюда видно, что учет релятивистской поправки полностью снимает случайное вырождение уровней в кулоновском поле: уровень с данным n расщепляется на n компонент в соответствии с возможными значениями момента $l = 0, 1, \dots, (n-1)$ для невозмущенного уровня. При этом сдвиг уровня с увеличением момента уменьшается, что физически естественно. Действительно, чем больше значение l , тем в среднем на больших расстояниях от ядра находится частица. Соответственно тем больше и ее по-

¹⁾ В частности,

$$\begin{aligned} \int \Psi_n^{(0)*} \hat{H}_0 \frac{Ze^2}{r} \Psi_n^{(0)} d^3r &= \\ &= \int (\hat{H}_0 \Psi_n^{(0)})^* \frac{Ze^2}{r} \Psi_n^{(0)} d^3r = E_n^{(0)} \int \frac{Ze^2}{r} |\Psi_n^{(0)}|^2 d^3r \end{aligned}$$

(ввиду эрмитовости \hat{H}_0 его действие можно перенести на функцию, стоящую в матричном элементе слева).

тенциальная энергия, а кинетическая энергия и сдвиг уровня $E_{n,r,l}^{(1)} \propto p^4$, наоборот, меньше (так как $\bar{T} + \bar{U} = E_n$). По этой же причине ширина интервала тонкой структуры уровня — разность энергий крайних компонент, отвечающих значениям $l = 0$ и $l = (n - 1)$, равная

$$\Delta E_{FS}(n) = 4(Z\alpha)^2 \frac{n-1}{n(2n-1)} |E_n^{(0)}|, \quad (6)$$

уменьшается с ростом n , здесь $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ — постоянная тонкой структуры. Отметим, что для уровня с $n = 2$ согласно (6) расщепление составляет $\Delta E_{FS}(2) = 1,21 \cdot 10^{-4} Z^4$ эВ.

Для значений $n \sim 1$ формула (5) дает

$$\left| E_{n,r,l}^{(1)} / E_n^{(0)} \right| \sim (Z\alpha)^2 \sim 10^{-4} Z^2,$$

так что условие применимости полученного результата предполагает, что $Z \ll 137$ (это — естественный результат, так как скорость электрона в атоме $v \sim Ze^2/\hbar = Z\alpha c$ и при значениях $Z \sim 100$ его уже нельзя считать нерелятивистским).

Сделаем несколько заключительных замечаний.

Как отмечалось в условии задачи, рассматриваемая поправка, не учитывающая спин-орбитального взаимодействия, относится к случаю бесспиновой частицы. При этом она правильно описывает сдвиг уровня в первом порядке теории возмущений по $(Z\alpha)^2$. Однако, как это следует из релятивистского уравнения для таких частиц — уравнения Клейна — Гордона, в более высоких приближениях возмущение гамильтониана не «повторяет» разложения (1) классической функции Гамильтона, см. в связи с этим 15.13—15.15. Реально существующие частицы со спином $s = 0$ (например, π - и K -мезоны) обладают *сильным взаимодействием*, оказывающим более существенное влияние на сдвиги атомных уровней, чем релятивистские поправки, см. 11.4.

При учете спин-орбитального взаимодействия для электрона тонкая структура водородоподобного атома с точечным ядром согласно уравнению Дирака имеет следующую характерную особенность [29]. Уровень с данным n , имеющий согласно нерелятивистской теории кратность вырождения $2n^2$ (2 — из-за спина), при учете релятивистских поправок расщепляется на n компонент (как и в случае бесспиновой частицы), каждая из которых отвечает определенному значению j полного момента электрона $j = 1/2, 3/2, \dots, n - 1/2$. При этом случайное вырождение снимается не полностью, так как остаются вырожденными уровни с одинаковым значением j , но с различными значениями орбитального момента $l = j \pm 1/2$. Так, для $n = 2$ уровень расщепляется на две компоненты, одна из которых отвечает $2p_{3/2}$ -состояниям,

а другая — вырожденным $2s_{1/2}$ - и $2p_{1/2}$ -состояниям. При этом интервал тонкой структуры равен $\Delta E_{FS} \approx 4,5 \cdot 10^{-5} Z^4$ эВ. Дальнейшее снятие вырождения по l (*лэмбовский сдвиг*) возникает при учете так называемых *радиационных поправок* [29], о величине эффекта см. 11.62.

11.2. Согласно классической электродинамике взаимодействие двух магнитных моментов друг с другом имеет вид ²⁾ $V = -\mu_1 \mathcal{H}_2(r)$, см. [27], где

$$\mathcal{H}_2(r) = \text{rot } \mathbf{A}_2 = \text{rot } \frac{[\mu_2 \mathbf{r}]}{r^3} \equiv \{(\mu_2 \nabla) \nabla - \mu_2 \Delta\} \frac{1}{r}$$

— магнитное поле, создаваемое 2-м моментом в точке нахождения 1-го. Квантовомеханическим обобщением этого взаимодействия на случай спиновых магнитных моментов является оператор взаимодействия \hat{V} , получаемый заменой классических величин на соответствующие операторы (считаем 1-й момент электронным, $e > 0$):

$$\mu_1 \rightarrow \hat{\mu}_e = -\frac{e\hbar}{m_e c} \hat{\mathbf{s}}, \quad \mu_2 \rightarrow \hat{\mu}_{\text{яд}} = \frac{\mu_0}{I} \hat{\mathbf{I}}.$$

При этом эрмитов оператор \hat{V} можно записать в виде

$$\hat{V} = \frac{e\hbar\mu_0}{m_e c I} \hat{I}_i \hat{S}_k \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \delta_{ik} \Delta \right) \frac{1}{r}. \quad (1)$$

Рассматривая его как возмущение и учитывая вид с. ф. s -состояний невозмущенного гамильтониана $\Psi^{(0)} = \psi_{ns}^{(0)}(r) \chi$, где χ — спиновая функция электрона и ядра, усредним оператор \hat{V} в соответствии с секулярным уравнением ³⁾ (VIII.5) по координатам электрона. При этом имеем

$$\int |\psi_{ns}^{(0)}(r)|^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \delta_{ik} \Delta \right) \frac{1}{r} d^3r = C \delta_{ik}$$

²⁾ Взаимная перестановка частиц не изменяет вида взаимодействия.

³⁾ Такое усреднение является общим для всех матричных элементов оператора возмущения \hat{V} между рассматриваемыми ns -состояниями атома. При этом то обстоятельство, что при вычислении сверхтонкого расщепления правильные функции нулевого приближения отвечают определенному значению орбитального момента ($l = 0$ в данной задаче), связано с тем, что случайное кулоновское вырождение атомных уровней снимается уже при учете релятивистских поправок, приводящих к (более «грубой») тонкой структуре атомного спектра, см. предыдущую задачу (заметим, что рассматриваемое взаимодействие \hat{V} не приводит к перемешиванию $s_{1/2}$ - и $p_{1/2}$ -состояний).

(пропорциональность интеграла тензору δ_{ik} связана с тем, что ввиду сферической симметрии s -состояния нет никаких других тензорных величин). Для определения значения C выполним свертку по индексам i и k . Учитывая, что $\delta_{ii} = 3$ и

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{r} \equiv \Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r),$$

находим $C = (8\pi/3) |\psi_{ns}^{(0)}(0)|^2$. Таким образом, в результате усреднения получаем

$$\bar{V} = \frac{8\pi e\hbar\mu_0}{3m_e c I} |\psi_{ns}^{(0)}(0)|^2 (\hat{\mathbf{I}} \hat{\mathbf{s}}); \quad |\psi_{ns}^{(0)}(0)|^2 = \frac{Z^3 e^6 m_e^3}{\pi \hbar^6 n^3}. \quad (2)$$

При этом \bar{V} все еще является оператором, действующим в пространстве спиновых состояний электрона и ядра. Очевидно, что собственными функциями этого оператора являются спиновые функции, отвечающие определенному значению $J = I \pm 1/2$ полного момента (спина) атома, а его с. з. определяют *сверхтонкое расщепление ns-уровня*

$$E_{\text{HFS}} = E_{n,J}^{(1)} = \frac{4\pi e\hbar\mu_0}{3m_e c I} |\psi_{ns}^{(0)}(0)|^2 \cdot \begin{cases} I, & J = I + 1/2, \\ -(I + 1), & J = I - 1/2, \end{cases} \quad (3)$$

(т. е. уровень расщепляется на два подуровня в соответствии с двумя возможными значениями суммарного спина атома, сравнить с 3.27).

Величина сверхтонкого расщепления

$$\Delta E_{\text{HFS}}(ns) = E_{\text{HFS}}\left(J = I + \frac{1}{2}\right) - E_{\text{HFS}}\left(J = I - \frac{1}{2}\right) = \frac{4\pi(2I + 1)e\hbar\mu_0}{3m_e c I} |\psi_{ns}^{(0)}(0)|^2. \quad (4)$$

Сравнение (для значений $n \sim 1$ и $Z \sim 1$) с интервалом тонкой структуры (6) из 11.1 дает $\Delta E_{\text{HFS}}/\Delta E_{\text{FS}} \sim m_e/m_p \sim 10^{-3}$, т. е. сверхтонкое расщепление значительно меньше тонкой структуры.

Для основного состояния, $n = 1$, атома водорода согласно (4) получаем $\Delta v_{\text{HFS}}(1s) = \Delta E_{\text{HFS}}/2\pi\hbar \approx 1420$ МГц, как и экспериментальное значение. Однако более тщательное сравнение показывает, что теоретический результат 1418,6 МГц отличается от экспериментального значения 1420,4 МГц на $\approx 0,1\%$. Это на порядок превосходит величину неучтенных релятивистских поправок ($\sim \alpha^2 \sim 10^{-4}$, при вычислениях следует учесть отличие приведенной массы ер-системы от m_e). Объяснение расхождения связано с наличием у электрона *аномального* магнитного момента, с учетом которого его магнитный момент равен $\mu_0(1 + \alpha/2\pi)$, где $\mu_0 = -e\hbar/2m_e c$, см. [29].

Сделаем два заключительных замечания. При обобщении полученных результатов на компоненты тонкой структуры с от-

личным от нуля орбитальным моментом следует, наряду с взаимодействием магнитных моментов, учитывать также взаимодействие с магнитным полем ядра и орбитального тока электрона: $j_{\text{орб}} = 0$ при $l = 0$. Далее, магнитное взаимодействие не является единственной причиной сверхтонкого расщепления уровней. Вклад в него вносит также и искажение кулоновского потенциала, связанное с наличием у ядра со спином $I \geq 1$ квадрупольного момента. Однако он менее существен, чем вклад от магнитного взаимодействия, а для s -состояний вообще отсутствует.

11.3. Обозначим $\varphi(r)$ потенциал, создаваемый ядром. Вне ядра⁴⁾ $\varphi = Ze/r$, а отличие потенциала от кулоновского $\delta\varphi = \varphi - Ze/r$ в области ядра определяет возмущение $V = -e\delta\varphi(r)$. При этом сдвиги кулоновских ns -уровней равны

$$\Delta E_{ns} = \int V(r) |\Psi_{ns}^{(0)}(r)|^2 d^3r \approx -e |\Psi_{ns}^{(0)}(0)|^2 \int \delta\varphi(r) d^3r. \quad (1)$$

Здесь положено $|\Psi_{ns}^{(0)}(r)|^2 \approx |\Psi_{ns}^{(0)}(0)|^2$, так как в ф. $\Psi_{ns}^{(0)}(r)$ в области ядра (т. е. на расстояниях $r \leq R \approx 10^{-13} - 10^{-12}$ см), по которой и проводится интегрирование, почти не изменяется⁵⁾. Значение интеграла (1) зависит от характера распределения заряда в ядре. При этом, учитывая, что $\Delta r^2 = 6$, интеграл в (1) можно преобразовать к виду⁶⁾

$$\begin{aligned} \int \delta\varphi(r) dV &= \frac{1}{6} \int \delta\varphi \Delta r^2 dV = \frac{1}{6} \int r^2 \Delta(\delta\varphi(r)) dV = \\ &= -\frac{2\pi}{3} \int r^2 \rho(r) dV = -\frac{2\pi Ze}{3} \langle r^2 \rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\rho(r)$ — плотность заряда внутри ядра,

$$\langle r^2 \rangle = r_e^2 = \frac{1}{Ze} \int r^2 \rho(r) dV,$$

при этом r_e называют среднеквадратичным *зарядовым* (протонным) радиусом ядра. Заметим, что величина $\langle r^2 \rangle$ определяет также поведение электрического формфактора ядра $F(q)$ при $q \rightarrow 0$:

$$F(q) \approx Ze \left(1 - \frac{1}{6} \langle r^2 \rangle q^2 \right)$$

(сравнить с атомным формфактором, см. [1, § 139]).

4) Имеется в виду ядро со сферически-симметричным распределением заряда.

5) Для состояний с моментом $l \neq 0$ на малых расстояниях $\Psi \propto r^l$, так что сдвиг уровня резко уменьшается с увеличением l .

6) При этом использовано уравнение Пуассона электростатикн, согласно которому $\Delta(\delta\varphi) = -4\pi(\rho - Ze\delta(r))$ и учтено, что вклад слагаемого с δ -функцией в интеграл (2) равен нулю.

Для равномерного распределения заряда по шару радиуса R имеем, очевидно, $\langle r^2 \rangle = 3R^2/5$ и согласно формуле (1) получаем ⁷⁾

$$\Delta E_{ns} = \frac{2\pi}{5} Ze^2 R^2 |\Psi_{ns}^{(0)}(0)|^2; \quad |\Psi_{ns}^{(0)}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_B^3 n^3}. \quad (3)$$

Числовое значение отношения

$$|\Delta E_{ns}/E_n^{(0)}| = \frac{4}{5n} Z^2 \left(\frac{R}{a_B}\right)^2 \approx 8 \cdot 10^{-10} \frac{Z^{8/3}}{n} \quad (4)$$

(здесь для оценки положено $R \approx 1,5 \cdot 10^{-13} Z^{1/3}$ см). Оно существенно меньше аналогичных отношений для релятивистской поправки, см. 11.1, и сверхтонкого расщепления, см. 11.2, и при $Z \sim 1$ составляет $\sim 10^{-5}$ и $\sim 10^{-2}$ от значений этих величин соответственно.

Интересно оценить вклад размера протона, для которого среднеквадратичный зарядовый радиус $r_e \approx 0,8 \cdot 10^{-13}$ см, в величину лэмбовского сдвига уровней $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ атома водорода, см. 11.1. Согласно (1) и (2) получаем

$$\Delta E_{2s} = \frac{1}{12} \left(\frac{r_e}{a_B}\right)^2 \frac{e^2}{a_B} \approx 5,2 \cdot 10^{-10} \text{ эВ} \approx 0,12 \text{ МГц}$$

(сдвиг $2p_{1/2}$ -уровня при этом в $(a_B/r_e)^2 \sim 10^{10}$ раз меньше!). Так как экспериментальное значение лэмбовского сдвига составляет $\Delta_{LS} \approx 1058$ МГц, то вклад размера протона в него несуществен и находится на уровне экспериментальной ошибки в измерении Δ_{LS} .

Заметим, что эффекты неточности ядра более резко проявляются в μ -мезоатомах. Это связано с тем, что боровский радиус мюона $a_{\mu, B} = (m_e/m_\mu) a_B$ в 207 раз меньше электронного. Соответственно в оценку (4) теперь должен быть введен дополнительный множитель, равный $(m_\mu/m_e)^2 \approx 4,3 \cdot 10^4$. При этом для основного уровня, $n = 1$, уже при значении $Z = 27$ имеем $|\Delta E_{1s}/E_{1s}^{(0)}| \approx 0,2$.

11.4. Рассмотрим влияние короткодействующего потенциала $U_S(r)$ радиуса r_S (так что можно считать $U_S(r) \approx 0$ при значениях $r \gg r_S$) на уровни частицы с энергией $|E_n^{(0)}| \ll \hbar^2/mr_S^2$, существующие в «дальнодействующем» потенциале $U_L(r)$ радиуса $r_L \gg r_S$. Последний на расстояниях $r \sim r_S$ предполагается

⁷⁾ Этот же результат может быть получен непосредственно по формуле (1), если в ней воспользоваться известным из электростатики выражением $\phi = Ze(3R^2 - r^2)/2R^3$ для потенциала внутри равномерно заряженного шара радиуса R .

слабым, так что $U_L \ll \hbar^2/mr_S^2$, однако при $r \gtrsim r_L$ никаких ограничений на его величину не накладывается. Применительно к адронным атомам в роли U_L выступает потенциал кулоновского притяжения адронов, а U_S описывает их *сильное* (ядерное) взаимодействие. При этом, например, для пионных атомов $r_L \sim a_{\pi, B} = \hbar^2/m_{\pi}e^2 \approx 2 \cdot 10^{-11}$ см, а $r_S \approx 2 \cdot 10^{-13}$ см. Для достаточно произвольного взаимодействия U_S сдвиги невозмущенных уровней $E_n^{(0)}$ малы и описываются формулами *теории возмущений по длине рассеяния*, которые могут быть получены в результате простой модификации формул обычной теории возмущений по потенциалу.

Начнем со случая, когда $U_L(r)$ — центральный потенциал, и рассмотрим сдвиги s -уровней. Согласно обычной теории возмущений по потенциалу в первом приближении имеем

$$\Delta E_{ns} = \int U_S(r) |\Psi_{ns}^{(0)}(r)|^2 d^3r \approx |\Psi_{ns}^{(0)}(0)|^2 \int U_S(r) d^3r \quad (1)$$

(в интеграле существенны расстояния $r \leq r_S$; ввиду малости r_S значение невозмущенной в. ф. при этом почти не изменяется и она может быть вынесена из-под интеграла, сравнить с формулой (1) из предыдущей задачи).

Теперь заметим, что последний интеграл в формуле (1) с точностью до множителя совпадает с *амплитудой рассеяния* частицы с энергией $E = 0$ в потенциале $U_S(r)$ в борновском приближении, см. (XIII.6). Учитывая, что $a_s = -f(E = 0)$ является *длиной рассеяния* (s -волны) для потенциала $U_S(r)$, перепишем (1) в виде

$$\Delta E_{ns} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} |\Psi_{ns}^{(0)}(0)|^2 a_s^B, \quad a_s^B = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U_S(r) d^3r, \quad (2)$$

здесь a_s^B — длина рассеяния в борновском приближении.

Формулы (1) и (2) применимы лишь в случае «слабого» потенциала $U_S(r)$, удовлетворяющего условию применимости теории возмущений, $U_S \ll \hbar^2/mr_S^2$, при этом также $|a_s^B| \ll r_S$. Если же потенциал U_S является «сильным», то они непосредственно не применимы. Тем не менее и в этом случае выражение для сдвига уровня может быть получено в результате простой модификации формулы (2): в ней следует только заменить борновскую длину рассеяния a_s^B на точную длину рассеяния a_s в потенциале $U_S(r)$. При этом, вообще говоря, $a_s \sim r_s$ и сдвиг уровня остается малым. Действительно, для дальнедействующего потенциала притяжения $U_L(r)$ радиуса r_L характерные значения

энергетических уровней $E_n^{(0)} \sim \hbar^2/mr_L^2$ и для s -состояний в. ф. в нуле $|\Psi_{ns}^{(0)}(0)|^2 \sim r_L^{-3}$. Сдвиги s -уровней согласно (2) $\Delta E_{ns} \sim (a_s/r_L) E_{ns}^{(0)}$ при значениях $a_s \ll r_L$ малы (случай $a_s \gg r_L$ см. ниже).

Для пояснения указанного формального приема учета влияния короткодействующего потенциала прежде всего приведем рис. 38, иллюстрирующий качественное изменение в. ф. рассматриваемого состояния частицы (сравнить с 4.29 и приведенным там рисунком). Сплошная линия на нем изображает невозмущенную в. ф. $\Psi_{ns}^{(0)}(r)$, удовлетворяющую условию ограниченности при $r=0$. Штриховая линия соответствует в. ф. $\Psi_{ns}(r)$ при учете потенциала $U_s(r)$. Эта в. ф. обладает следующими свойствами: 1) она ограничена в точке $r=0$; 2) ее явный вид на расстояниях $r \leq r_s$ существенно зависит от потенциала

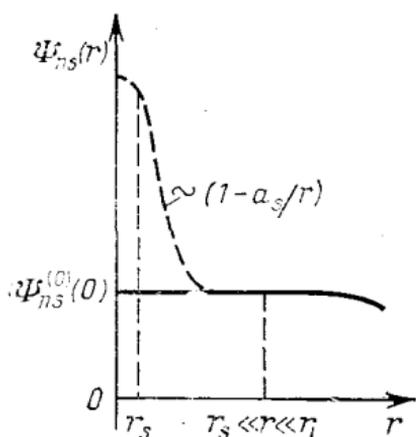


Рис. 38

$U_s(r)$; 3) вне области действия U_s на расстояниях

$$r_s \ll r \ll r_L, \quad (m|E_n|/\hbar^2)^{-1/2} \quad (3)$$

она имеет вид $\Psi_{ns} \approx A(1 - a_s/r)$, где a_s — длина рассеяния в потенциале U_s , и (почти) не зависит от величины E_n и вида потенциала U_L . Это связано с тем, что на расстояниях (3) у.Ш. приближенно принимает вид $\Delta\Psi_{ns}(r) = 0$, или $(r\Psi_{ns}(r))'' = 0$.

Теперь заметим, что при значениях длины рассеяния, удовлетворяющих условию

$$|a_s| \ll r_L \quad \text{и} \quad (m|E_n^{(0)}|/\hbar^2)^{-1/2}, \quad (4)$$

точная в. ф. $\Psi_{ns}(r)$, сильно отличаясь от невозмущенной в. ф. $\Psi_{ns}^{(0)}(r)$ на малых расстояниях, в области $r \gg |a_s|$ с ней уже почти совпадает. Отсюда и следует вывод о том, что сдвиг уровня мал, а его величина зависит лишь от значения длины рассеяния a_s , но не от конкретного вида потенциала $U_s(r)$. На этом основана возможность рассмотрения влияния короткодействующего потенциала U_s , состоящая в замене его на некоторый фиктивный потенциал (псевдопотенциал) $\mathcal{U}_s(r)$, который уже можно рассматривать как возмущение; причем борновская длина

рассеяния \tilde{a}_s^B в потенциале ⁸⁾ должна совпадать с a_s , а его радиус должен удовлетворять условию, аналогичному (4) для a_s , сравнить с [28, § 6].

Получим теперь формулу для сдвига уровня непосредственно из уравнения Шрёдингера. Исходим из уравнений

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U_L - E_{ns}^{(0)} \right] \Psi_{ns}^{(0)} &= 0, \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U_L + U_S - E_{ns} \right] \Psi_{ns} &= 0. \end{aligned}$$

Умножая первое из них на Ψ_{ns}^* , а второе — на $\Psi_{ns}^{(0)*}$, почленно вычитая одно из другого и интегрируя по всему пространству, за исключением шаровой области радиуса d вблизи начала координат (причем выбираем d так, что $r_s \ll d \ll r_L$), находим

$$\Delta E_{ns} \cdot \int_{r \geq d} \Psi_{ns}^{(0)*} \Psi_{ns} dV = \frac{\hbar^2}{2m} \oint_{r=d} (\Psi_{ns}^{(0)*} \nabla \Psi_{ns} - \Psi_{ns}^* \nabla \Psi_{ns}^{(0)}) ds \quad (5)$$

(фазы в. ф. выбраны так, что отношение $\Psi_{ns}^{(0)}/\Psi_{ns}$ вещественно, при этом слагаемые с U_L сокращаются).

Имея в виду малость сдвига уровня и близость в. ф. $\Psi_{ns}^{(0)}$ и Ψ_{ns} в области расстояний $r \gg r_s$, a_s , вносящей доминирующий вклад в нормировочный интеграл, интеграл в левой части соотношения (5) можно заменить единицей. В правой же части можно воспользоваться асимптотиками волновых функций на расстояниях $r_s \ll r \ll r_L$ вида

$$\Psi_{ns}^{(0)}(r) \approx \Psi_{ns}^{(0)}(0), \quad \Psi_{ns}(r) \approx \left(1 - \frac{a_s}{r}\right) \Psi_{ns}^{(0)}(0)$$

и получить

$$\Delta E_{ns} = E_{ns} - E_{ns}^{(0)} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left| \Psi_{ns}^{(0)}(0) \right|^2 a_s \quad (6)$$

в согласии с отмеченным выше обобщением формулы (2).

Сделаем несколько замечаний в отношении формулы (6).

⁸⁾ Выбор потенциала $U_s(r)$, конечно, неоднозначен и достаточно произволен. Имея в виду рассмотрение его в первом порядке теории возмущений, можно ограничиться простейшим выражением

$$\tilde{U}_s = \alpha \delta(r), \quad \text{где } \alpha = 2\pi\hbar^2 a_s / m.$$

Заметим, что такой «потенциал», в отличие от одномерного δ -потенциала и трехмерной δ -сферы, имеет формальный смысл и может рассматриваться только как возмущение, причем лишь в первом порядке.

1) Условием ее применимости является выполнение использованного при ее выводе соотношения (4). Оно может нарушаться только в резонансном случае, когда в потенциале $U_S(r)$ имеется «мелкий» (реальный или виртуальный) уровень⁹⁾ с моментом $l = 0$ и энергией

$$E_S \sim E_{ns}^{(0)} \ll \hbar^2/mr_S^2.$$

В этом случае сдвиги уровней уже не описываются формулой (6) и могут быть большими¹⁰⁾ — сравнимыми с расстоянием между невозмущенными уровнями $E_{ns}^{(0)}$, так что может возникать перестройка энергетического спектра в дальнедействующем потенциале под влиянием короткодействующего центра — эффект Зельдовича (сравнить с 4.11 и 9.3).

2) Формула (6) применима, вообще говоря, и в случае нецентральных потенциалов $U_L(r)$.

3) Обратим внимание на то, что знак сдвига уровней определяется знаком длины рассеяния a_s (а не потенциала $U_S(r)$). Для отталкивательного потенциала длина рассеяния всегда больше нуля и уровни, естественно, сдвигаются вверх («выталкиваются»). Для потенциала притяжения возможны оба знака a_s (в случае «мелкой» ямы $a_s < 0$ и уровни сдвигаются вниз).

4) Отмеченный выше прием учета влияния «сильного» короткодействующего центра $U_S(r)$, основанный на предварительном рассмотрении его как «слабого» возмущения с последующей заменой борновской длины рассеяния на точную a_s , является общим и может быть применен и в тех случаях, когда исходная формула отличается от (1), как, например, в задачах 4.27 и 8.61.

5) Обобщение формулы (6) на случай отличных от нуля орбитальных моментов частицы дано в 13.36, а теория возмущений по длине рассеяния для состояний непрерывного спектра рассмотрена в 13.37.

6) Отметим, наконец, что формула (6) справедлива без каких-либо ограничений на вид взаимодействия на малых расстоя-

⁹⁾ Наличие в потенциале $U_S(r)$ своих «глубоких» уровней с энергией $|E_S| \sim \hbar^2/mr_S^2$ не приводит к каким-либо ограничениям в применимости формулы (6) (такие уровни, если они существуют, под влиянием потенциала $U_L(r)$ также испытывают лишь небольшой сдвиг).

¹⁰⁾ Если область притяжения в потенциале $U_S(r)$ отделена малопроницаемым барьером, то сдвиги уровней «дальнедействующего» потенциала всегда малы. В частности, это имеет место для состояний с отличным от нуля орбитальным моментом, где в роли такого барьера выступает центробежный потенциал, см. также 11.74.

ниях. Оно может даже не носить потенциального характера и, в частности, приводить к неупругим процессам (как, например, в случае р-р-атома, для которого возможна аннигиляция в пионы). При этом, однако, длина рассеяния a_s становится комплексной величиной. Комплексным оказывается и сдвиг уровня. При этом его мнимая часть определяет ширину уровня, так как при включении неупругого взаимодействия рассматриваемое состояние становится уже *квазистационарным*, см. задачи § 5 главы 6.

11.5. В пренебрежении взаимодействием между электронами энергия основного состояния системы $E_0^{(0)} = -Z^2$, а его волновая функция имеет вид

$$\Psi_0^{(0)} = \frac{1}{\pi} Z^3 \exp[-Z(r_1 + r_2)].$$

Поправка первого порядка к энергии за счет взаимодействия электронов друг с другом

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \int \frac{|\Psi_0^{(0)}(r_1, r_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 = \\ &= \frac{Z^6}{\pi^2} \int e^{-2Z(r_1+r_2)} \frac{r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 d\Omega_1 d\Omega_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Для вычисления интегралов вида

$$\int f(r_1) g(r_2) \frac{r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 d\Omega_1 d\Omega_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2}} \quad (2)$$

удобно сначала при фиксированном \mathbf{r}_1 проинтегрировать по углам вектора \mathbf{r}_2 в сферических координатах, выбрав направление \mathbf{r}_1 за полярную ось. При этом

$$\int \frac{d\Omega_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int \frac{\sin \theta d\theta d\varphi}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} = \begin{cases} \frac{4\pi}{r_1}, & r_1 > r_2, \\ \frac{4\pi}{r_2}, & r_2 > r_1, \end{cases}$$

и выражение (2) принимает вид

$$\begin{aligned} 16\pi^2 \left\{ \int_0^\infty f(r_1) r_1 \int_0^{r_1} g(r_2) r_2^2 dr_2 dr_1 + \right. \\ \left. + \int_0^\infty g(r_2) r_2 \int_0^{r_2} f(r_1) r_1^2 dr_1 dr_2 \right\}. \end{aligned} \quad (2')$$

По формулам (2), (2') нетрудно найти

$$\int \frac{e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 = 32\pi^2 \frac{\alpha^2 + \beta^2 + 3\alpha\beta}{\alpha^2\beta^2(\alpha + \beta)^3} \quad (3)$$

и согласно (1) получить (положив в (3) $\alpha = \beta = 2Z$)

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -Z^2 + \frac{5}{8}Z. \quad (4)$$

При этом потенциал ионизации оказывается равным

$$I_0 = E_{0, \text{H}} - E_0 = \frac{1}{2}Z^2 - \frac{5}{8}Z \quad (5)$$

(здесь $E_{0, \text{H}} = -Z^2/2$ — основной уровень соответствующего одноэлектронного иона).

Заметим, что полученные на основе первого порядка теории возмущений по взаимодействию электронов друг с другом результаты можно улучшить, не производя фактически дополнительных вычислений. Для этого изменим «разбиение» гамильтониана системы на \hat{H}_0 и возмущение, выбрав в невозмущенном гамильтониане вместо заряда Z ядра некоторый эффективный заряд $Z_{\text{эф}}$, т. е. положим

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{\text{эф}}, \quad \hat{H}_0 = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - Z_{\text{эф}} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right),$$

$$V_{\text{эф}} = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - (Z - Z_{\text{эф}}) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right).$$

При этом выбор $Z_{\text{эф}} < Z$, отражающий взаимную экранировку электронами заряда ядра, приводит к «уменьшению» возмущения $V_{\text{эф}}$ по сравнению со случаем $V = 1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, использованным в (1). Из физических соображений представляется естественным такой выбор значения $Z_{\text{эф}}$, при котором поправка первого приближения обращается в нуль, т. е. $\bar{V}_{\text{эф}} = 0$. Так как теперь $E_0^{(0)} = -Z_{\text{эф}}^2$, а

$$\langle \Psi_{\text{эф}}^{(0)} | \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \Psi_{\text{эф}}^{(0)} \rangle = \frac{5}{8}Z_{\text{эф}},$$

$$\langle \Psi_{\text{эф}}^{(0)} | \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) | \Psi_{\text{эф}}^{(0)} \rangle = -\frac{2E_0^{(0)}}{Z_{\text{эф}}}$$

(последнее соотношение следует, например, из теоремы вириала, см. также 11.1), то из условия $\bar{V}_{\text{эф}} = 0$ находим $Z_{\text{эф}} = Z - 5/16$ и получаем

$$E_0 = -\left(Z - \frac{5}{16} \right)^2, \quad I_0 = \frac{1}{2}Z^2 - \frac{5}{8}Z + \frac{25}{256} \quad (6)$$

(сравнить с (4), (5); заметим, что «новое» значение $E_0^{(0)}$ совпадает с результатом вариационного расчета в 11.6).

В таблице представлено сравнение результатов расчета потенциалов ионизации I_0 в эВ с экспериментальными данными для ряда двухэлектронных ионов (атомная единица энергии равна 27,2 эВ)

Ион	He	Li ⁺	Be ⁺⁺	C ⁴⁺	O ⁶⁺
Согласно (5)	20,4	71,4	150	388	735
Согласно (6) и 11.6	23,1	74,0	152	390	737
Эксперим. значение I_0	24,6	75,6	154	392	739

Заметим, что поправки второго приближения к полученным результатам (4), (5) и (6) по параметру теории возмущений Z^{-1} и $Z_{эф}^{-1}$ соответственно не зависят от Z . Поэтому видная из представленной таблицы «слабая» зависимость от Z разницы экспериментального и рассчитанного значений I_0 вполне естественна.

11.6. Среднее значение энергии двухэлектронного иона в состоянии с пробной волновой функцией

$$\Psi_{\text{проб}} = \frac{\alpha^3}{\pi} \exp[-\alpha(r_1 + r_2)], \quad \alpha \equiv Z_{эф},$$

легко найти, если

1) записать гамильтониан системы в виде

$$\hat{H} = -\left(\frac{1}{2}\Delta_1 + \frac{\alpha}{r_1}\right) - \left(\frac{1}{2}\Delta_2 + \frac{\alpha}{r_2}\right) - (Z - \alpha)\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

2) учесть соотношение

$$\left(\frac{1}{2}\Delta + \frac{\alpha}{r}\right)e^{-\alpha r} = \frac{\alpha^2}{2}e^{-\alpha r},$$

3) воспользоваться значениями интегралов

$$\int \frac{1}{r} e^{-2\alpha r} dV = \frac{\pi}{\alpha^2}, \quad \int |\Psi_{\text{проб}}|^2 \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{5\alpha}{8}$$

(вычисление второго из них см. в 11.5).

В результате находим

$$\bar{E}(\alpha) = \alpha(\alpha - 2Z + 5/8).$$

Минимизация по параметру α дает (при $\alpha = Z_{эф} = Z - 5/16$) искомое вариационное значение энергии основного состояния двухэлектронного атома (или иона)

$$E_{0, \text{вар}} = \min \bar{E}(\alpha) = - \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 \quad (1)$$

и потенциал ионизации системы

$$I_0 = - \frac{1}{2} Z^2 - E_0 = \frac{1}{2} Z^2 - \frac{5}{8} Z + \frac{25}{256}. \quad (2)$$

Сравнение с экспериментальными данными см. в таблице из предыдущей задачи.

Для иона H^- согласно (1) имеем $E_{0, \text{вар}} = -0,47$, что выше энергии основного уровня атома водорода, равной $-0,50$, и поэтому нельзя сделать вывода о существовании устойчивого (относительно автоионизации) иона H^- , см. по этому поводу 11.8.

11.7. Для решения задачи запишем $\bar{E} = \langle \Psi_{\text{проб}} | \hat{H} | \Psi_{\text{проб}} \rangle$ в виде интеграла по переменной u . Варьирование получающегося функционала по $\psi^*(u)$ позволит получить оптимальный вид в. ф. $\psi(u)$. Для преобразования исходного интеграла по координатам электронов удобно воспользоваться сферическими переменными и, сделав замену переменной $r_2 = u - r_1$, проинтегрировать по r_1 .

Нормировочный интеграл принимает вид

$$N \equiv \int |\Psi_{\text{проб}}|^2 r_1^2 dr_1 d\Omega_1 r_2^2 dr_2 d\Omega_2 = \int_0^\infty \frac{u^5}{30} |\psi(u)|^2 du. \quad (1)$$

Заметив, что

$$\Delta_2 \psi(r_1 + r_2) = \frac{1}{(u - r_1)^2} \frac{\partial}{\partial u} (u - r_1)^2 \frac{\partial}{\partial u} \psi(u),$$

находим среднюю кинетическую энергию электронов в рассматриваемом состоянии:

$$\begin{aligned} \bar{T} = 2\bar{T}_2 &= - \int_0^\infty \psi^*(u) \int_0^u \frac{\partial}{\partial u} (u - r_1)^2 \frac{\partial}{\partial u} \psi(u) r_1^2 dr_1 du = \\ &= - \int_0^\infty \psi^*(u) \left[\frac{u^5}{30} \frac{d^2}{du^2} + \frac{u^4}{6} \frac{d}{du} \right] \psi(u) du. \quad (2) \end{aligned}$$

Энергия взаимодействия электронов с ядром описывается выражением

$$\begin{aligned} \bar{U}_{e \text{ яд}} = 2\bar{U}_2 &= -2Z \int_0^\infty |\psi(u)|^2 \int_0^u (u-r_1) r_1^2 dr_1 du = \\ &= - \int_0^\infty \frac{Zu^4}{6} |\psi(u)|^2 du, \quad (3) \end{aligned}$$

а энергия взаимодействия электронов друг с другом может быть записана в виде

$$\begin{aligned} U_{ee} &= 2 \iint_{r_1 \leq r_2} |\Psi_{\text{проб}}|^2 \frac{dV_1 dV_2}{|r_1 - r_2|} = \\ &= 2 \int_0^\infty |\psi(u)|^2 \int_0^{u/2} (u-r_1) r_1^2 dr_1 du = \int_0^\infty \frac{5u^4}{96} |\psi(u)|^2 du \quad (4) \end{aligned}$$

(так как $\psi(r_1 + r_2)$ не зависит от углов, то интегрирование по углам в исходном выражении (4) может быть выполнено так же, как и в интеграле (2) из задачи 11.5).

Вид оптимальной функции $\psi(u)$, для которой $\bar{E} = \bar{T} + \bar{U}_{e \text{ яд}} + \bar{U}_{ee}$ принимает минимальное значение, удобно искать из условия экстремальности функционала $\bar{E} - E_{0, \text{вар}} N$. Здесь $E_{0, \text{вар}}$ играет роль множителя Лагранжа; введение слагаемого $E_{0, \text{вар}} N$ позволяет при варьировании не «заботиться» о нормировке в. ф. $\psi(u)$. Воспользовавшись выражениями (1)–(4), из условия обращения в нуль вариации рассматриваемого функционала при варьировании функции $\psi^*(u)$, приходим к уравнению (сравнить с вариационным принципом для уравнения Шрёдингера в [1, § 20]):

$$\left[\frac{d^2}{du^2} + \frac{5}{u} \frac{d}{du} + \left(5Z - \frac{25}{16} \right) \frac{1}{u} + E_{0, \text{вар}} \right] \psi(u) = 0.$$

Отсюда заменой функции $\psi(u) = u^{-5/2} \chi(u)$ (которая предполагает, что $\chi(0) = 0$) получаем уравнение

$$\chi'' - \frac{15}{4u^2} \chi + \left(5Z - \frac{25}{16} \right) \frac{1}{u} \chi + E_{0, \text{вар}} \chi = 0. \quad (5)$$

Оно имеет вид радиального у. Ш. (IV.5) (с $\hbar = m = 1$) для частицы в кулоновском потенциале $-\alpha/r$ с $\alpha = \frac{5}{2} \left(Z - \frac{5}{16} \right)$ и

с «моментом» l таким, что $l(l+1) = 15/4$, или ¹¹⁾ $l = 3/2$; при этом $E_{n_r, l} = \frac{1}{2} E_{0, \text{вар}}$. Спектр собственных значений

$$E_{n_r, l} = -\frac{\alpha^2}{2(n_r + l + 1)^2} = -\frac{25(Z - 5/16)^2}{8(n_r + 5/2)^2}$$

и минимальное из них, с $n_r = 0$, определяет вариационное значение энергии основного состояния системы на рассматриваемом классе пробных функций

$$E_{0, \text{вар}} = 2E_{0, 3/2} = -(Z - 5/16)^2. \quad (6)$$

При этом соответствующая функция, минимизирующая значения E , имеет вид (согласно (5) она — радиальная кулоновская функция для $l = 3/2$ и $n = n_r + l + 1 = 5/2$)

$$\chi = C u^{l+1} e^{-\alpha u/n}, \quad \text{или} \quad \Psi_0 = \frac{1}{\pi} Z_{\text{эф}}^3 \exp\{-Z_{\text{эф}}(r_1 + r_2)\}, \quad (7)$$

где $Z_{\text{эф}} = Z - 5/16$.

Эти результаты и доказывают утверждение задачи.

11.8. Расчет $\bar{E} = \iint \Psi(r_1, r_2) \hat{H} \Psi(r_1, r_2) dV_1 dV_2$ сводится к вычислению нескольких интегралов, которые выражаются через следующие четыре:

$$\int e^{-\gamma r} dV = \frac{8\pi}{\gamma^3}, \quad \int \frac{1}{r} e^{-\gamma r} dV = \frac{4\pi}{\gamma^2},$$

$$\int e^{-\alpha r} \Delta e^{-\beta r} dV = - \int (\nabla e^{-\alpha r}) (\nabla e^{-\beta r}) dV = \frac{8\pi\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^3}$$

и интеграл (3) из задачи 11.5.

В результате вычислений получаем

$$\bar{E}(\alpha, \beta) = 2C^2 \left\{ -Z(\alpha + \beta) + \frac{1}{2}(\alpha^2 + \beta^2) + \frac{\alpha\beta}{\alpha + \beta} + \frac{\alpha^2\beta^2}{(\alpha + \beta)^3} + \right. \\ \left. + 20 \frac{\alpha^3\beta^3}{(\alpha + \beta)^5} + 64[\alpha\beta - Z(\alpha + \beta)] \frac{\alpha^3\beta^3}{(\alpha + \beta)^6} \right\}, \quad (1)$$

где $2C^2 = [1 + 64\alpha^3\beta^3/(\alpha + \beta)^6]^{-1}$ из условия нормировки пробной волновой функции.

При значениях $\alpha = \beta = Z - 5/16$ из (1) следует результат 11.6. Однако возможность независимого варьирования параметров α и β позволяет его уточнить. В частности, для иона H^- , выбрав $\alpha = 1$ и $\beta = 0,25$, находим

$$E_{0, \text{вар}} = \bar{E} = -0,512, \quad (2)$$

¹¹⁾ Для другого значения, $l = -5/2$, волновая функция $\chi \propto u^{l+1}$ не удовлетворяет граничному условию в нуле.

что ниже энергии основного состояния атома водорода, равной $-1/2$, и тем самым доказываются существование устойчивого иона H^- (прецизионный вариационный расчет дает $E_0 = -0,528$).

11.9. В рассматриваемой модели энергия nL -состояния гелиеподобного атома, одинаковая для пара- и ортосостояний, представляет сумму энергии $E_{n=1} = -Z^2/2$ основного состояния водородоподобного атома с зарядом ядра Z и энергии $E_n = -(Z-1)^2/2n^2$ состояния с главным квантовым числом n в поле экранированного заряда $Z-1$. Таким образом, энергия и потенциал ионизации системы в рассматриваемом приближении равны

$$E_{nL}(z) = -\frac{Z^2}{2} - \frac{(Z-1)^2}{2n^2}, \quad I_{nL}(Z) = \frac{(Z-1)^2}{2n^2}. \quad (1)$$

Для $2L$ -состояний атома гелия получаем $I_{2L}(He) = 0,125$, что следует сравнить с экспериментальными значениями

Терм	2^3S	2^1S	2^3P	2^1P
$I_{\text{эксп.}}$	0,175	0,146	0,133	0,124
(1) с поправкой Ридберга	0,172	0,145	0,134	0,124

Для $3L$ -состояний атома гелия согласно модели $I_{3L}(He) = 556 \cdot 10^{-4}$, а экспериментальные значения

Терм	3^3S	3^1S	3^3P	3^1P	3^3D	3^1D
$I_{\text{эксп.}} \cdot 10^4$	685	612	580	550	560	555
(1) с поправкой Ридберга	684	611	582	551	557	556

Рассмотренная модель основана, по существу, на возможности пренебрежения «перекрытием» в.ф. $1s$ - и nl -электронов ($s \equiv l$). При значениях $n \gg 1$ это обеспечивается большим размером орбиты nl -электрона (напомним, что $r_n \propto n^2$) и соответственно малой вероятностью нахождения его в области локализации $1s$ -электрона. Для уточнения результата, учитывающего квазиклассичность движения электрона при $n \gg 1$, следует ввести поправку Ридберга Δ_l (не зависящую от n , см. [1, § 68]),

заменяв n на $n + \Delta_l$. Как видно из таблиц, ее введение¹²⁾ существенно увеличивает точность, особенно для S -термов, и при рассмотренных выше значениях¹³⁾ $n = 2$ и 3 . Что же касается состояний с моментом $l \neq 0$, то для них рассмотренная модель неплохо воспроизводит экспериментальные данные и без введения поправки Ридберга. Это связано с тем, что с ростом l вероятность нахождения электрона в области малых расстояний быстро уменьшается, так как при этом $\Psi_l \propto r^l$. Соответственно быстро уменьшается с ростом l и значение поправки Ридберга.

11.10. Нормированная пространственная часть волновой функции 2^3S -состояния имеет вид ($\alpha \equiv Z_{эф}$)

$$\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(r_1) \psi_2(r_2) - \psi_2(r_1) \psi_1(r_2) \}, \quad (1)$$

$$\psi_1(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r}, \quad \psi_2(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{8\pi}} \left(1 - \frac{1}{2} \alpha r \right) e^{-\alpha r/2}. \quad (2)$$

Для вычисления средней энергии в состоянии с в. ф. (1) удобно записать гамильтониан системы в виде суммы трех слагаемых

$$\hat{H} = \left\{ -\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\alpha}{r_1} - \frac{\alpha}{r_2} \right\} - (Z - \alpha) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3. \quad (3)$$

Так как волновая функция (1) является с. ф. гамильтониана \hat{H}_1 , то сразу находим $\bar{\hat{H}}_1 = -5\alpha^2/8$. Также сразу, с использованием теоремы вириала, находим среднее значение

$$\bar{\hat{H}}_2 = \frac{Z - \alpha}{\alpha} \left(-\frac{\alpha}{r_1} - \frac{\alpha}{r_2} \right) = -\frac{5}{4} \alpha (Z - \alpha). \quad (4)$$

Наконец, $\bar{\hat{H}}_3 = K - J$, где

$$K = \iint \psi_1^2(r_1) \psi_2^2(r_2) \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (5)$$

$$J = \iint \psi_1(r_1) \psi_2(r_1) \psi_1(r_2) \psi_2(r_2) \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (6)$$

¹²⁾ Экспериментальные значения поправок Ридберга Δ_{Sl} для атома гелия (S — суммарный спин электронов) равны [1, § 68]:

$$\begin{aligned} \Delta_{0s} &= -0,140, & \Delta_{0p} &= +0,012, & \Delta_{0d} &= -0,0022 & (\text{при } S = 0), \\ \Delta_{1s} &= -0,296, & \Delta_{1p} &= -0,068, & \Delta_{1d} &= -0,0029 & (\text{при } S = 1). \end{aligned}$$

¹³⁾ Здесь опять проявляется отмечавшаяся ранее в задачах главы 9 особенность квазиклассического приближения: при правильном выборе квазиклассической поправки в правиле квантования оно обеспечивает достаточно высокую точность даже при значениях $n \sim 1$.

характеризует кулоновское взаимодействие электронов. Первая часть его, связанная с интегралом K , имеет очевидную классическую интерпретацию, определяя кулоновское взаимодействие плотностей заряда, отвечающих $1s$ - и $2s$ -электронам. Интеграл J определяет так называемое *обменное взаимодействие*. Оно является частью кулоновского взаимодействия электронов и имеет чисто квантовое происхождение, связанное со свойствами симметрии в. ф. системы тождественных частиц.

Имея в виду выражения (2) для функций $\psi_{1,2}(r)$, замечаем, что расчет K и J сводится к вычислению интегралов

$$I_{k,n} = \iint \frac{r_1^k r_2^n}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} dV_1 dV_2,$$

где n, k — целые числа. Для них

$$\begin{aligned} I_{k,n} &= (-1)^{k+n} \frac{\partial^k}{\partial \alpha^k} \frac{\partial^n}{\partial \beta^n} \iint \frac{e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 \equiv \\ &\equiv (-1)^{k+n} \frac{\partial^k}{\partial \alpha^k} \frac{\partial^n}{\partial \beta^n} I_{0,0}, \end{aligned}$$

а интеграл $I_{0,0}$ был вычислен ранее, см. формулу (3) из 11.5. Теперь простое, но несколько утомительное вычисление дает $K = 17\alpha/81$ и $J = 16\alpha/729$ (заметим, что обменная часть кулоновского взаимодействия в 10 раз меньше прямого кулоновского взаимодействия электронов).

Таким образом, получаем

$$\bar{E}(\alpha) = \bar{H}_1 + \bar{H}_2 + K - J = \frac{5}{8} \alpha^2 - \frac{5}{4} \alpha Z + \frac{137}{729} \alpha$$

и минимизация по параметру $\alpha = Z_{\text{эф}}$ дает искомое вариационное значение энергии

$$E(2^3S) = \min \bar{E} = -\frac{5}{8} \left(Z - \frac{548}{3645} \right)^2 \approx -\frac{5}{8} (Z - 0,150)^2, \quad (7)$$

при этом $Z_{\text{эф}} = Z - 0,150$, и потенциал ионизации рассматриваемого состояния

$$I(2^3S) = \frac{5}{8} (Z - 0,150)^2 - \frac{1}{2} Z^2. \quad (8)$$

Согласно (8) имеем $I = 0,139$ для атома гелия и $I = 0,576$ для иона лития Li^+ (довольно значительное отличие для атома гелия вариационного значения I от экспериментального связано с тем, что в пробной функции было использовано одинаковое значение эффективного заряда как для «внутреннего» $1s$ -, так и «внешнего» $2s$ -электронов, сравнить с 11.6 и 11.8).

11.11. Задача решается аналогично 11.2. Теперь оператор возмущения имеет вид $\hat{V} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2$, где $\hat{V}_{1,2}$ описывает взаимодействие каждого из электронов с магнитным полем ядра, см. формулу (1) из 11.2 (из-за сферической симметрии S -состояния взаимодействие орбитального тока электронов с магнитным полем в первом порядке отсутствует). Усредняя оператор \hat{V} с волновой функцией $\Psi(r_1, r_2)$ пространственного движения электронов в 2^3S -состоянии, находим

$$\bar{\hat{V}} = \frac{8\pi e\hbar\mu}{3m_e c I} C (\hat{I} \hat{S}), \quad (1)$$

где $\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$ — оператор суммарного спина электронов, а

$$C = \int |\Psi(0, r_2)|^2 dV_2 = \int |\Psi(r_1, 0)|^2 dV_1. \quad (2)$$

Собственные значения оператора $\bar{\hat{V}}$ (в пространстве спиновых состояний) определяют сверхтонкую структуру уровня. Так как $S = 1$, а $I = 1/2$, то

$$E_{\text{HFS}} = \frac{8\pi e\hbar\mu C}{3m_e c} \cdot \begin{cases} 1, & J = 3/2, \\ -2, & J = 1/2 \end{cases} \quad (3)$$

(J — полный момент системы); при этом величина сверхтонкого расщепления равна

$$\Delta E_{\text{HFS}} = \left| E_{\text{HFS}} \left(J = \frac{3}{2} \right) - E_{\text{HFS}} \left(J = \frac{1}{2} \right) \right| = \frac{8\pi e\hbar\mu C}{m_e c}. \quad (4)$$

Воспользовавшись для в. ф. приближенным выражением

$$\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(r_1) \psi_2(r_2) - \psi_2(r_1) \psi_1(r_2) \},$$

где $\psi_{1,2}$ — волновые функции водородоподобного атома с $Z = 2$ для $1s$ - и $2s$ -состояний, находим:

$$C = \frac{1}{2} (|\psi_1(0)|^2 + |\psi_2(0)|^2) = \frac{9}{2\pi} a_B^{-3}, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}. \quad (5)$$

Численное значение ΔE_{HFS} согласно (4), (5) оказывается равным

$$\Delta \nu_{\text{HFS}} = \Delta E_{\text{HFS}} / 2\pi\hbar \approx 7340 \text{ МГц}. \quad (6)$$

Как видно, доминирующий вклад в сверхтонкое расщепление вносит $1s$ -электрон. Вклад $2s$ -электрона в рассматриваемом приближении в 8 раз меньше. На самом деле его вклад еще меньше, так как в. ф. $2s$ -электрона в нуле (при $r = 0$) меньше из-за экранировки заряда ядра $1s$ -электроном. Если для в. ф. $\psi_2(r)$ воспользоваться значением, отвечающим экранированному заряду

$Z = 1$, то вклад $2s$ -электрона оказывается меньше уже в 64 раза; при этом вместо (6) получаем $\Delta\nu_{\text{HFS}} \approx 6630$ МГц, что, естественно, ближе к экспериментальному значению.

В заключение заметим, что для вычисления сверхтонкого расщепления можно было бы воспользоваться выражением для магнитного поля, создаваемого s -электроном «на ядре», см. 7.24, и учесть взаимодействие с ним магнитного момента ядра.

11.12. Замечаем, что в пренебрежении взаимодействием электронов, когда

$$E_{n_1 n_2} = -\frac{1}{2} Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right),$$

энергия состояния, в котором оба электрона возбуждены, т. е. для них $n_{1,2} \geq 2$, выше энергии $E_0 = -Z^2/2$ основного состояния соответствующего одноэлектронного иона, что и указывает на неустойчивость системы. Действительно, в результате взаимодействия между электронами может произойти (авто)ионизация системы, когда один из электронов переходит в состояние непрерывного спектра, а одноэлектронный ион при этом оказывается в своем основном, $1s$ -состоянии.

Представляется очевидным, что учет взаимодействия между электронами, носящего отталкивательный характер, лишь повышает энергию системы, так что сделанный вывод сохраняется. Формальное доказательство повышения энергетических уровней основано на соотношении (1.6). Для этого рассмотрим гамильтониан

$$\hat{H}(\beta) = -\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{\beta}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Для его с. з. $E_n(\beta)$, относящихся к д. с., имеем

$$\frac{\partial E_n}{\partial \beta} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \beta} = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} > 0,$$

так что включение ее-взаимодействия повышает уровни.

В заключение заметим, что сделанный вывод о неустойчивости относительно автоионизации рассматриваемых состояний двухэлектронной системы основывался только на энергетических соображениях. При этом среди состояний, связанных с электронной конфигурацией $2pnl$ с $n \geq 2$, имеется ряд состояний, устойчивых относительно ионизации, так как их распад запрещен законами сохранения момента и четности. Это — состояния с суммарным орбитальным моментом системы $L \geq 1$ и четностью, равной $(-1)^{L+1}$ (например, $3P^+$ -терм для электронной конфигурации $(2p)^2$, см. по этому поводу 11.72).

11.13. В рассматриваемой модели энергию состояния трех-электронного атома (или иона) с электронной конфигурацией $(1s)^2nl$, $n \geq 2$, можно приближенно представить в виде двух слагаемых: E_0 — энергии основного состояния соответствующего двухэлектронного иона, сопоставляемой двум $1s$ -электронам, и E_n — энергии внешнего nl -электрона в кулоновском поле ядра, заряд которого частично экранирован двумя $1s$ -электронами, определяющей потенциал ионизации системы

$$I_n = |E_n| = (Z - 2)^2/2n^2.$$

Его численное значение для нижних $2S$ - и $2P$ -состояний атома лития одинаково (в рассматриваемой модели) и составляет $I_{2L} = 0,125$ а. е. $\approx 3,40$ эВ.

В заключение отметим, что общие соображения о характере рассмотренной модели и о возможности ее уточнения аналогичны высказанным в решении 11.9. Имея их в виду, ограничимся указанием значения поправки Ридберга $\Delta_0 = -0,400$ для S -состояний, с учетом которой получаем $I_{2S} = 5,31$ эВ (близкое к экспериментальному значению; для P -термов $\Delta_1 = -0,047$).

11.14. Атомные термы, отвечающие электронной конфигурации $(np)^k$ сверх заполненных оболочек, представлены в таблице

Конфигурация	$np, (np)^5$	$(np)^2, (np)^4$	$(np)^3$	$(np)^6$
Термы	${}^2P_{1/2, 3/2}$	${}^1S_0, {}^1D_2,$ ${}^3P_{0, 1, 2}$	${}^2P_{1/2, 3/2},$ ${}^2D_{3/2, 5/2},$ ${}^4S_{3/2}$	1S_0
Четность l	-1	$+1$	-1	$+1$

Так как четность состояния электрона с орбитальным моментом l равна $(-1)^l$ и является мультипликативной величиной (при этом для электронов, образующих заполненную оболочку, она положительна, $+1$), то $I = (-1)^k$.

Нормальными термами, согласно правилам Гунда, являются ${}^2P_{1/2}, {}^3P_0, {}^4S_{3/2}, {}^3P_2, {}^2P_{3/2}$ соответственно в случаях а) — д) (в порядке возрастания k), см. по этому поводу 11.17, 11.18.

11.15. Волновая функция двух электронов должна быть антисимметричной по отношению к перестановке спиновых и пространственных переменных обоих электронов. Так как: 1) радиальная зависимость в.ф. двух эквивалентных электронов симметрична при перестановке r_1 и r_2 , 2) спиновая часть в.ф. симметрична при суммарном спине электронов $S = 1$ и антисимметрична при $S = 0$, 3) характер симметрии угловой зависимости

в. ф. определяется значением L суммарного орбитального момента, см. 3.30, то приходим к следующему заключению о значениях S и L для термов, отвечающих электронной конфигурации $(nl)^2$:

$$\begin{aligned} S = 0, \quad L = 2l, 2l - 2, \dots, 0 & \quad (\text{синглетные термы}), \\ S = 1, \quad L = 2l - 1, 2l - 3, \dots, 1 & \quad (\text{триплетные термы, } l \neq 0), \end{aligned}$$

сравнить с 10.8 и 10.9.

11.16. Пространственные части волновых функций термов имеют вид

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(r_1) \psi_2(r_2) \pm \psi_2(r_1) \psi_1(r_2) \}, \quad (1)$$

где знаки $+$ и $-$ отвечают синглетному и триплетному термам, ψ_1 и ψ_2 представляют в. ф. ns - и $n'l$ -электронов. В пренебрежении взаимодействием электронов в. ф. (1) отвечают одинаковой энергии, изменение которой за счет взаимодействия электронов в первом порядке теории возмущений равно

$$\Delta E_{\pm} = \langle \Psi_{\pm} | \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \Psi_{\pm} \rangle \equiv K \pm J.$$

При этом *обменный* интеграл (сравнить с 11.10)

$$J = \iint \psi_1^*(r_1) \psi_2^*(r_1) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_1(r_2) \psi_2(r_2) dV_1 dV_2 \quad (2)$$

определяет расщепление термов.

Покажем, что $J > 0$. Замечая, что без ограничения общности в. ф. ψ_1 (невыврожденного) ns -состояния можно считать вещественной, и записав¹⁴⁾ ψ_2 в виде $\psi_2 = \varphi_1 + i\varphi_2$, где $\varphi_{1,2}$ — уже вещественные функции, перепишем выражение (2) следующим образом:

$$J = \iint \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_1(r_1) \psi_1(r_2) \{ \varphi_1(r_1) \varphi_1(r_2) + \\ + \varphi_2(r_1) \varphi_2(r_2) \} dV_1 dV_2.$$

Положительность этого выражения следует из сравнения его с известными формулами для энергии электростатического поля,

¹⁴⁾ Одноэлектронные nl -уровни с $l \neq 0$, как и рассматриваемые термы ${}^{1,3}L$ с $L = l$, вырождены по проекции момента. Так как энергия не зависит от значения l_z , то, рассматривая состояние с $L_z = l_z = 0$ и учитывая вещественность в этом случае волновой функции ψ_2 , можно заключить, что $J > 0$ непосредственно на основании выражения (2).

создаваемого распределением заряда с объемной плотностью $\rho(\mathbf{r})$ [27]:

$$W = \int \frac{E^2(\mathbf{r})}{8\pi} dV = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r}_1)\rho(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 > 0.$$

Таким образом, $J > 0$ и синглетный терм выше триплетного. Физическое объяснение этого обстоятельства состоит в том, что в антисимметричном по координатам электронов триплетном состоянии плотность вероятности обращается в нуль при $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, что приводит к уменьшению энергии кулоновского взаимодействия электронов (и энергии системы в целом) по сравнению со случаем синглетного терма; сравнить с условием максимальной S для основного терма атома согласно правилу Гунда [1, § 67].

В заключение заметим, что в рассматриваемом приближении не фигурируют электроны заполненных оболочек. Их наличие проявляется неявно в виде самосогласованного поля, определяющего одноэлектронные в. ф. $\psi_{1,2}$ «внешних» электронов. О точности такого приближения см. задачи 11.17 и 11.18.

11.17. Нормированная на единицу волновая функция отдельного p -электрона имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (\mathbf{a}\mathbf{n}) \varphi(r); \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad |\mathbf{a}|^2 = 1, \quad \int \varphi^2 r^2 dr = 1,$$

а координатная часть волновой функции системы из двух np -электронов с определенным значением L суммарного орбитального момента описывается выражением

$$\Psi_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = a_{ik}(L) n_{1i} n_{2k} \varphi(r_1) \varphi(r_2), \quad (1)$$

сравнить с 3.45. При этом в зависимости от значения L тензор $a_{ik}(L)$ обладает следующими свойствами:

$$a_{ik} = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{16\pi^2}} \delta_{ik}, & L = 0 \quad (S\text{-терм}), \\ \sqrt{\frac{9}{32\pi^2}} \varepsilon_{ikl} b_l, \quad |\mathbf{b}|^2 = 1, & L = 1 \quad (P\text{-терм}), \\ a_{ki}, \quad a_{ii} = 0, \quad a_{ik} a_{ik}^* = \frac{9}{16\pi^2}, & L = 2 \quad (D\text{-терм}). \end{cases} \quad (2)$$

Как видно, в. ф. S - и D -термов симметричны по отношению к перестановке \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , так что эти термы являются синглетными, $S = 0$, а антисимметричный в координатах P -терм — триплетный, $S = 1$.

В пренебрежении взаимодействием np -электронов все термы имеют одинаковую энергию, изменение которой за счет их

$$E_L^{(1)} = \iint |\Psi_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 \quad (3)$$

можно записать в виде

$$E_L^{(1)} = 2a_{ik}a_{lm}^* \int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 r_1^2 r_2^2 \varphi^2(r_1) \varphi^2(r_2) \times \\ \times \iint \frac{n_{1i}n_{2k}n_{1l}n_{2m} d\Omega_1 d\Omega_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2}}. \quad (4)$$

Здесь учтено, что вклад областей интегрирования $r_1 > r_2$ и $r_1 < r_2$ в выражении (3) одинаков.

Выполним в (4) сначала интегрирование по углам первого электрона, записав из соображений о тензорном характере интеграла

$$\int \frac{n_{1i}n_{1l} d\Omega_1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2}} = A\delta_{il} + Bn_{2i}n_{2l}. \quad (5)$$

Взяв здесь первый раз свертку по индексам i и l , а второй раз умножив (5) на $n_{2i}n_{2l}$, получаем два соотношения (при $r_2 > r_1$):

$$3A + B = \int_{-1}^1 \frac{2\pi dz}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2z}} = \frac{4\pi}{r_2}, \quad (6)$$

$$A + B = \int_{-1}^1 \frac{2\pi z^2 dz}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2z}} = \frac{\pi}{3r_2^3} \left(\frac{8}{5} r_1^2 + 4r_2^2 \right),$$

позволяющие определить A и B (при вычислении интегралов по θ_1 , φ_1 удобно полярную ось направить вдоль вектора \mathbf{n}_2 , при этом $\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2 = \cos \theta_1 \equiv z$).

Теперь выполним интегрирование по углам второго электрона, воспользовавшись известными соотношениями

$$\int n_i n_k d\Omega = \frac{4\pi}{3} \rho_{ik},$$

$$\int n_i n_k n_l n_m d\Omega = \frac{4\pi}{15} (\delta_{ik}\delta_{lm} + \delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}).$$

В результате интегрирований по углам электронов выражение (4) принимает вид

$$E_L^{(1)} = 2a_{ik}(L) a_{lm}^*(L) \int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 r_1^2 r_2^2 \varphi^2(r_1) \varphi^2(r_2) \times \\ \times \left[\frac{4\pi}{3} \delta_{il} \delta_{km} A + \frac{4\pi}{15} (\delta_{ik} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) B \right]. \quad (7)$$

Эту формулу, используя соотношения (2) и значения A , B , следующие из (6), можно записать в виде

$$E_L^{(1)} = 2 \int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 r_1^2 r_2^2 \varphi^2(r_1) \varphi^2(r_2) \left[1 + \frac{8}{5} b_L \frac{r_1^2}{r_2^2} \right], \quad (8)$$

где

$$b_L = \begin{cases} 1/4, & L = 0, \\ -1/8, & L = 1, \\ 1/40, & L = 2. \end{cases}$$

Отсюда непосредственно следует порядок расположения термов

$$E(^3P) < E(^1D) < E(^1S),$$

так что нормальным является терм 3P в согласии с правилами Гунда [1], а также приведенное в условии задачи соотношение между энергиями термов. Подчеркнем, что это соотношение не зависит от конкретного вида в. ф. np -электрона, определяемого самосогласованным полем электронов заполненных оболочек (явно они вообще не учитываются!), и поэтому может быть использовано в качестве критерия точности рассматриваемого приближения. В связи с этим сравним рассчитанное значение отношения $\Delta = 3/2$ с его экспериментальными значениями для некоторых атомов и ионов, имеющих электронную конфигурацию $(np)^2$, а также $(np)^4$ (т. е. две дырки на np -оболочке), представленными в таблице (они взяты из книги [17, с. 138])

Атом	C	N ⁺	O ²⁺	O	Si	Ge	Sn	Te
Конфигур.	$2p^2$	$2p^2$	$2p^2$	$2p^4$	$3p^2$	$4p^2$	$5p^2$	$5p^4$
$\Delta_{\text{эксп.}}$	1,13	1,14	1,14	1,14	1,48	1,50	1,39	1,50

11.18. Возможные термы 4S , 2P , 2D . Расчет сдвигов их энергий за счет взаимодействия np -электронов друг с другом может быть выполнен так же, как и в предыдущей задаче. Однако те-

перь он более громоздок, что связано с более сложной структурой волновой функции трехэлектронной системы.

Начнем с термина 4S , отвечающего максимально возможному значению суммарного спина $S = 3/2$. При этом спиновая часть $\chi_{\alpha\beta\gamma}$ волновой функции симметрична по отношению к перестановке спиновых переменных любых двух электронов. Соответственно пространственная часть в. ф. (фактически угловая часть, так как радиальная зависимость в. ф. для всех электронов одинакова) должна быть антисимметричной, что однозначно определяет угловую зависимость волновой функции в виде

$$n_1 [n_2 n_3] \equiv \varepsilon_{ikl} n_{1i} n_{2k} n_{3l},$$

так что

$$\Psi({}^4S) = C_1 \varepsilon_{ikl} n_{1i} n_{2k} n_{3l} \Phi(r_1) \Phi(r_2) \Phi(r_3) \chi_{\alpha\beta\gamma} \quad (1)$$

(так как координатная часть в. ф. является скаляром, точнее псевдоскаляром, и не изменяется при вращениях, то она действительно отвечает моменту $L = 0$ и описывает S -терм, сравнить с 3.47). Нормировка в. ф. (1) дает $C_1^2 = 9/128\pi^3$ (при вычислении нормировочного интеграла следует учесть значения «угловых» интегралов, указанные в предыдущей задаче и известное соотношение $\varepsilon_{ikl}^2 = 6$).

Сдвиг 4S -терма за счет взаимодействия электронов друг с другом в первом порядке теории возмущений равен

$$\Delta E({}^4S) = \bar{V}_{12} + \bar{V}_{13} + \bar{V}_{23} = 3\bar{V}_{12} = 3 \iiint |\Psi({}^4S)|^2 \frac{dV_1 dV_2 dV_3}{|r_1 - r_2|}. \quad (2)$$

После элементарного интегрирования по r_3 это выражение принимает вид формулы (4) из предыдущей задачи, в которой только следует заменить $a_{ik} a_{lm}^*$ на

$$4\pi C_1^2 (\delta_{il} \delta_{km} - \delta_{im} \delta_{kl}); \quad (3)$$

при этом использовано соотношение

$$\varepsilon_{ikl} \varepsilon_{stl} = \delta_{is} \delta_{kt} - \delta_{it} \delta_{ks}.$$

С учетом указанной замены и все остальные формулы из 11.17, вплоть до (7) включительно, непосредственно переносятся на данную задачу. Более того, после подстановки (3) в формулу (7) из 11.17, для сдвига (2) 4S -терма получается выражение, отличающееся от результата (8) из 11.17 лишь дополнительным множителем, равным 3, причем значение параметра b_L оказывается равным $b({}^4S) = -1/8$.

Перейдем к терму 2P . Так как он отвечает орбитальному моменту $L = 1$, то координатная часть в. ф. терма должна выражаться через компоненты вектора. Такой вектор, в условиях задачи линейный по всем трем векторам \mathbf{n}_a , где $a = 1, 2, 3$, может быть образован тремя независимыми способами:

$$(\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) \mathbf{n}_3, \quad (\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_3) \mathbf{n}_2, \quad (\mathbf{n}_2 \mathbf{n}_3) \mathbf{n}_1.$$

При этом условии антисимметричности волновой функции, представляющей суперпозицию этих векторов, умноженных на соответствующие спиновые функции, однозначно определяет ее вид:

$$\Psi({}^2P) = \varphi(r_1) \varphi(r_2) \varphi(r_3) C_{2i} \{ (\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) n_{3i} e_{\alpha\beta} \chi_\gamma - (\mathbf{n}_2 \mathbf{n}_3) n_{1i} e_{\gamma\beta} \chi_\alpha - (\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_3) n_{2i} e_{\alpha\gamma} \chi_\beta \}. \quad (4)$$

Здесь α, β, γ — спиновые переменные соответственно 1, 2 и 3 электронов; антисимметричная спиновая функция $e_{\alpha\beta} = -e_{\beta\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ описывает состояние соответствующих двух электронов с их суммарным спином, равным нулю (она нормирована на 2); $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ — нормированный на 1 спинор, определяющий как спиновое состояние одного из электронов (у двух других при этом суммарный спин равен нулю), так и всей системы с $S = 1/2$ в целом. Вектор C_2 характеризует орбитальное состояние терма, сравнить с 3.45. Дальнейшие вычисления аналогичны проведенным для 4S -терма. Нормировка в. ф. (4) дает $|C_2|^2 = 9/256\pi^3$. Сделанные выше замечания о связи сдвига S -терма с результатами предыдущей задачи непосредственно переносятся и на 2P -терм. Только теперь вместо выражения (3) появляется множитель

$$4\pi [2 |C_2|^2 \delta_{ik} \delta_{lm} + 2C_{2i} C_{2l}^* \delta_{km} + 2C_{2i} C_{2i}^* \delta_{km} - 3C_{2m} C_{2l}^* \delta_{ik} - 3C_{2i} C_{2m}^* \delta_{ik}], \quad (5)$$

а формула (8) из 11.17, умноженная на 3, определяет сдвиг терма $\Delta E({}^2P)$, если в ней положить b_L равным $b({}^2P) = 0$.

Наконец, терм 2D отвечает моменту $L = 2$ и координатная часть соответствующей ему волновой функции должна выражаться через компоненты симметричного тензора второго ранга, в условиях задачи линейного по всем векторам \mathbf{n}_a , с равным нулю следом. Такой тензор представляет определенную суперпозицию тензоров вида

$$[\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2]_i n_{3k} \equiv e_{ist} n_{1s} n_{2t} n_{3k} \quad (6)$$

и других, получаемых из приведенного перестановкой как индексов, так и векторов n_a . Вид этой суперпозиции определяется требованием антисимметричности волновой функции трехэлектронной системы ¹⁵):

$$\Psi(^2D) = C_{ik} \varepsilon_{ipl} \{ n_{1k} n_{2p} n_{3l} (\varepsilon_{\alpha\beta} \chi_\gamma + \varepsilon_{\alpha\gamma} \chi_\beta) + \\ + n_{1p} n_{2k} n_{3l} (\varepsilon_{\alpha\beta} \chi_\gamma + \varepsilon_{\gamma\beta} \chi_\alpha) + \\ + n_{1l} n_{2p} n_{3k} (\varepsilon_{\beta\gamma} \chi_\alpha + \varepsilon_{\alpha\gamma} \chi_\beta) \} \varphi(r_1) \varphi(r_2) \varphi(r_3). \quad (7)$$

Здесь $C_{ik} = C_{ki}$ и $C_{ii} = 0$, этот тензор определяет орбитальное состояние системы, см. 3.45. Смысл спиновых функций типа $\varepsilon_{\alpha\beta}$ и χ_γ такой же, как и в выражении (4). Нормировка этой волновой функции дает

$$C_{ik} C_{ik}^* = 1/128\pi^3.$$

Вычисление сдвига $\Delta E(^2D)$ терма опять приводит к выражению (8) из 11.17, умноженному на 3, причем значение b_L следует положить равным $b(^2D) = -1/20$.

Из приведенных выше значений b_L следует порядок расположения термов:

$$E(^4S) < E(^2D) < E(^2P),$$

так что нормальным является 4S -терм в согласии с правилом Гунда в отношении значения суммарного спина S такого терма ¹⁶), а также указанное в условии задачи отношение $\Delta = 2/3$ энергетических расстояний для рассматриваемых термов. Экспериментальные значения этого отношения для атомов с электронной конфигурацией $(np)^3$, взятые из [17, с. 138], приведены в таблице

Атом	N	O ⁺	S ⁺	As	Sb	Bi
Конфигур.	$2p^3$	$2p^3$	$3p^3$	$4p^3$	$5p^3$	$6p^3$
$\Delta_{\text{эксп.}}$	0,500	0,509	0,651	0,715	0,908	1,121

Сравнить с результатами предыдущей задачи.

¹⁵) Заметим, что выражение (6) антисимметрично по отношению к перестановке векторов n_1 и n_2 . Аналогично выражение (7) антисимметрично при перестановке внутри фигурных скобок индексов p и l , *свернутых* с индексами антисимметричного тензора ε_{ipl} .

¹⁶) В рассматриваемом случае $S = 3/2$. При этом для системы из трех эквивалентных p -электронов орбитальный момент $L = 0$.

11.19. Основное состояние системы как целого возникает в результате последовательного заполнения нижних по энергии одноэлектронных состояний. При этом плотность электронов $n(r)$ связана с максимальным значением $p_0(r)$ их импульса соотношением

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2} p_0^3(r) = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \frac{Z^{3/2}}{R^{3/2}} \frac{(1-\bar{x})^{3/2}}{\bar{x}^{3/2}}, \quad \bar{x} = \frac{r}{R}. \quad (1)$$

Здесь учтено, что максимальное значение энергии электронов

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2} p_0^2 - \frac{Z}{r} = \text{const} \equiv -\frac{Z}{R} \quad (2)$$

не зависит от r (это обеспечивает минимальность энергии всей системы). При $r > R$ имеем¹⁷⁾ $n = 0$, а само значение R определяется из условия нормировки и для нейтрального атома, $\int n(r) dV = Z$, оказывается равным $R = (18/Z)^{1/3}$.

Найденную плотность числа электронов интересно сравнить с результатом модели Томаса — Ферми. Для этого заметим, что если записать (1) в виде (XI.1,3), то для $\chi(x)$ получим (при $r \leq R$):

$$\chi_{\text{мод}}(x) = 1 - \frac{r}{R} = 1 - 0,338x; \quad x = Z^{1/3} \frac{r}{b}, \quad b = 0,885.$$

Сопоставление результатов рассматриваемой модели и модели Томаса — Ферми представлено в таблице

x	0	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0
$\chi_{\text{T.-Ф.}}(x)$	1	0,607	0,424	0,314	0,243	0,193	0,157
$\chi_{\text{мод}}(x)$	1	0,831	0,662	0,493	0,324	0,155	0

Более высокая вблизи ядра плотность электронов в рассматриваемой модели отражает отсутствие экранировки заряда ядра, связанное с пренебрежением взаимодействием электронов друг с другом, носящим отталкивательный характер.

Обсудим основные закономерности, следующие из рассматриваемой модели.

1) Так как плотность $n(r)$ нормирована на полное число электронов, равное Z , то функция $w(r) = n(r)/Z$ имеет смысл

¹⁷⁾ Так что в рассматриваемой модели атом имеет четко выраженный радиус. Однако для «периферийных» электронов эффект экранировки заряда ядра является определяющим и предсказания модели для них уже несостоятельны.

функции распределения вероятностей координат отдельного электрона. Очевидно $\bar{r}^n \propto Z^{-n/3}$, при этом нетрудно получить, что $\bar{r} \approx 0,98Z^{-1/3}$. Таким образом, электроны находятся в среднем на расстоянии от ядра, убывающем с ростом Z как $Z^{-1/3}$.

2) Плотность числа электронов в пространстве импульсов

$$\bar{n}(p) = \frac{1}{4\pi^3} V_q(p) = \frac{8Z^3}{3\pi^2 (p^2 + 2Z/R)^3}, \quad (3)$$

сравнить с (1). Здесь $V_q(p)$ — объем в r -пространстве, находясь в котором электрон еще может иметь импульс p . Как видно из соотношения (2), это — объем шара радиусом

$$r(p) = 2Z (p^2 + 2Z/R)^{-1/2}. \quad (4)$$

Эта плотность также нормирована на число электронов Z , так что выражение $\bar{w}(p) = \bar{n}(p)/Z$ имеет смысл функции распределения вероятности значений импульсов отдельного электрона. Теперь нетрудно получить

$$\bar{p} \approx 1,11Z^{2/3} \quad \text{и} \quad \overline{p^2} = (12)^{1/3} Z^{4/3} \approx 2,29Z^{4/3}.$$

Таким образом, характерная величина импульса электрона с ростом Z возрастает как $Z^{2/3}$.

3) С учетом 1) и 2) для характерных значений орбитального момента электронов имеем очевидную оценку

$$l_{\text{хар}} \sim r_{\text{хар}} \cdot p_{\text{хар}} \sim Z^{1/3}. \quad (5)$$

4) Воспользовавшись теоремой вириала, согласно которой для кулоновского взаимодействия $E = \bar{U}/2$, находим энергию полной ионизации атома

$$E_{\text{полн. ион.}} = \frac{1}{2} \int_0^R \frac{Z}{r} n(r) 4\pi r^2 dr = \left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} Z^{7/3} \approx 1,14Z^{7/3} \quad (6)$$

(интеграл вычисляется подстановкой $r/R = \sin^2 u$). Этот же результат следует и из соотношения $-E = \bar{T} = Z\overline{p^2}/2$, в то время как в модели Томаса — Ферми $E_{\text{полн. ион.}} \approx 0,77Z^{7/3}$ (более высокое значение (6) связано с пренебрежением взаимодействием электронов друг с другом, носящим отталкивательный характер, что понижает полную энергию системы).

Заметим, что в пренебрежении электрон-электронным взаимодействием энергия атома равна сумме энергий отдельных электронов $\epsilon_n = -Z^2/2n^2$. Размещая их по нижним уровням с учетом принципа Паули и кратности вырождения кулоновских

уровней, равной $2n^2$ (множитель 2 — из-за спина электрона), имеем

$$E_0 = \sum_{n=1}^{n_{\max}} 2n^2 \epsilon_n = -Z^2 n_{\max}, \quad \sum_{n=1}^{n_{\max}} 2n^2 = Z, \quad (7)$$

где n_{\max} — максимальное значение главного квантового числа уровня, на который еще попадают электроны. В случае $n_{\max} \gg 1$, заменяя во второй из сумм в (7) суммирование интегрированием, находим $n_{\max} \approx (3Z/2)^{1/3}$. При этом энергия основного состояния атома согласно первой из сумм в (7) оказывается совпадающей (с точностью до знака) с результатом (6) статистической модели.

В заключение подчеркнем, что результаты рассмотренной простой модели атома для основных физических характеристик электронов в нем отличаются от результатов модели Томаса — Ферми лишь численным коэффициентом ~ 1 и правильно передают их зависимость от Z .

В связи с данной задачей см. также 11.39.

11.20. Одноэлектронные s -уровни определяются квазиклассическим правилом квантования для электрона в самосогласованном поле ($U = -\varphi(r)$):

$$\int_0^{r_0} \sqrt{2[E_n + \varphi(r)]} dr = \pi(n + \gamma). \quad (1)$$

По смыслу распределения Томаса — Ферми (в каждом из нижних по энергии состояний — один электрон) общее число s -электронов в атоме равно удвоенному (с учетом спина) числу занятых уровней, для которых $E_n \leq E_{\max}$, где E_{\max} — максимальное значение энергии томас-фермиевских электронов. Для нейтрального атома $E_{\max} = 0$, и для соответствующего значения n_{\max} в (1) следует положить $r_0 = \infty$. Переходя к томас-фермиевским единицам (XI.3) и опуская квазиклассическую поправку $\gamma \sim 1$ в выражении (1), получаем для общего числа s -электронов в атоме

$$N(l=0) = 2n_{\max} \approx \frac{2}{\pi} \sqrt{2b} Z^{1/3} \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{\chi(x)}{x}} dx = aZ^{1/3}, \quad (2)$$

причем численное значение $a \approx 3,5$ (его можно найти, воспользовавшись для $\chi(x)$ простым приближенным выражением из 11.22).

Согласно (2) для $Z = 27$ имеем $N \approx 10$, в то время как в атоме ${}_{27}\text{Co}$ число s -электронов равно 8. Для $Z = 64$ согласно (2) $N = 14$, а число s -электронов в атоме ${}_{64}\text{Gd}$ составляет 12.

11.21. Энергия взаимодействия электронов друг с другом и с ядром определяется известными формулами электростатики [27]

$$U_{e \text{ яд}} = -Z \int \frac{n(r)}{r} dV, \quad (1)$$

$$U_{ee} = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r) \rho(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV dV' = \frac{1}{2} \iint \frac{n(r) n(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV dV'.$$

Кинетическая энергия электронов определяется из условия, что они распределены (с числами заполнения $n_k = 1$) по нижним энергетическим уровням в самосогласованном поле атома, и равна

$$T = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int n^{5/3}(r) dV \quad (2)$$

(это выражение является непосредственным следствием квазиклассической формулы для числа квантовых состояний

$$\Delta N = \frac{2\Delta\Gamma}{(2\pi)^3} = \frac{2\Delta V_q \Delta V_p}{(2\pi)^3},$$

которая при значениях $\Delta V_q = 1$ и $\Delta V_p = 4\pi p_{\text{max}}^3/3$ связывает плотность электронов $n = \Delta N$ с p_{max} , при этом $\overline{p^2} = 3p_{\text{max}}^2/5$).

Таким образом, энергия атома (или иона) в квазиклассическом приближении выражается через электронную плотность в виде

$$E[n(r)] = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10} \int n^{5/3} dV - Z \int \frac{n}{r} dV + \frac{1}{2} \iint \frac{n(r) n(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV dV'. \quad (3)$$

Вариация функционала $E[n(r)]$ равна

$$\delta E = \int \delta n(r) \left\{ \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{2} n^{2/3}(r) - \frac{Z}{r} + \int \frac{n(r') dV'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right\} dV$$

и условие, $\delta E = 0$, его экстремальности приводит к уравнению для функции $n(r)$, минимизирующей энергию атома

$$\frac{1}{2} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3}(r) - \frac{Z}{r} + \int \frac{n(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV' = 0. \quad (4)$$

Поддействовав оператором Лапласа на обе части этого уравнения и учтя при этом соотношение

$$\Delta |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

получаем дифференциальную форму уравнения (4)

$$\Delta \left[\frac{1}{2} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3}(r) \right] = -4\pi [Z\delta(r) - n(r)]. \quad (5)$$

Отсюда, имея в виду уравнение Пуассона электростатики, $\Delta\varphi = -4\pi\rho$, заключаем, что величина $\varphi = \frac{1}{2} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3}$ описывает электростатический потенциал атома, а уравнение (5) при этом

$$\Delta\varphi = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \varphi^{3/2}$$

(для значений $r \neq 0$) совпадает с уравнением Томаса — Ферми (XI. 2).

Из уравнения (4) при $r \rightarrow \infty$ следует, что $\int n(r) dV = Z$, т. е. минимальную энергию имеет именно нейтральный атом, а не ион¹⁸). Это доказывает устойчивость такого атома в модели Томаса — Ферми и в то же время означает, что статистическая модель не может объяснить существование устойчивых отрицательных ионов¹⁹): «лишним» электронам в таком ионе энергетически выгоднее покинуть его.

Установим теперь соотношения между величинами T , U_{ee} , $U_{e\text{яд}}$ для нейтрального атома. Обозначим через $n_0(r)$ объемную плотность электронов согласно модели Томаса — Ферми. Изменение значения функционала $E[n_0(r)]$, определяющего энергию атома, при замене функции $n_0(r)$ на $n(r) = (1 + \lambda)n_0(r)$ с $|\lambda| \ll 1$ равно

$$\delta E = E[n(r)] - E[n_0(r)] \approx \left(\frac{5}{3} T + 2U_{ee} + U_{e\text{яд}} \right) \lambda$$

и условие его экстремальности, $\delta E = 0$, дает

$$5T + 6U_{ee} + 3U_{e\text{яд}} = 0. \quad (6)$$

Аналогичным образом, рассмотрев преобразование вида $n(r) = n_0((1 + \lambda)r)$ с $|\lambda| \ll 1$, получаем

$$3T + 5U_{ee} + 2U_{e\text{яд}} = 0. \quad (7)$$

¹⁸) Из экстремальности функционала $E[n(r)]$ при дополнительном условии $\int n(r) dV = Z'$, отвечающем числу Z' электронов, при значениях $Z' < Z$ следуют обычные результаты для положительных атомных ионов, см. [1, § 70]; в случае $Z' > Z$ функционал не имеет экстремума.

¹⁹) Существование таких ионов связано со свойствами внешних электронных оболочек, рассмотрение которых в рамках статистической модели несостоятельно.

Из (6) и (7) следуют как соотношение $U_{e \text{ яд}} = -7U_{ee}$, так и теорема вириала $2T = -(U_{ee} + U_{e \text{ яд}}) \equiv -U$.

Наконец воспользуемся условием минимальности $E[n_0(r)]$ для вычисления энергии основного состояния нейтрального атома вариационным методом. Для указанной в условии пробной функции согласно выражению (3) получаем

$$E(\alpha, \lambda) = \frac{9}{400} \left(\frac{3\pi}{2} \right)^{2/3} \alpha^{5/3} \lambda^4 Z^{7/3} - \frac{1}{2} \alpha \lambda^2 Z^{7/3} + \frac{1}{16} \alpha^2 \lambda^2 Z^{7/3} \quad (8)$$

(при вычислении U_{ee} удобно воспользоваться значением интеграла (2) из 11.5). Минимизация значения выражения (8) сначала по параметру λ дает

$$E(\alpha) = \min_{(\lambda=\lambda_0)} E(\alpha, \lambda) = -\frac{25}{576} \left(\frac{2}{3\pi} \right)^{2/3} \alpha^{1/3} (\alpha - 8)^2 Z^{7/3}, \quad (9)$$

при этом

$$\lambda_0^2(\alpha) = \frac{25(8-\alpha)}{18} \left(\frac{2}{3\pi\alpha} \right)^{2/3},$$

а последующая минимизация по параметру α , при $\alpha = \alpha_0 = 8/7$, определяет энергию атома

$$E_{0, \text{ вар}} \approx -0,759 Z^{7/3}, \quad (10)$$

и значение параметра $\lambda_0(\alpha_0) = 1,761$; сравнить с точным результатом $E_0 = -0,769 Z^{7/3}$ для модели Томаса — Ферми.

В заключение сделаем замечание о свойствах пробной функции $n_{\text{проб}}(r)$. Формально она нормирована на число электронов, равное αZ , но получаемое с помощью ее значение $E_{0, \text{ вар}}$ относится именно к нейтральному атому с числом электронов Z (выбор же $\alpha = 1$ приводит к менее точному значению E_0 , хотя отличие и несущественно: вместо 0,759 в (10) появляется значение 0,757). Рассматриваемая пробная функция после выполнения минимизации по λ соответствует выбору универсальной функции $\chi(x)$ модели Томаса — Ферми в виде ($b = 0,885$)

$$\chi_{\text{проб}}(x) = \frac{25(8-\alpha)}{144} \exp(-\bar{\lambda} \sqrt{x});$$

$$x = Z^{1/3} \frac{r}{b}, \quad \bar{\lambda} = \frac{2}{3} \lambda_0(\alpha) \sqrt{b}.$$

Нетрудно заметить, что отличие $\chi_{\text{проб}}$ от точной функции $\chi_{\text{Т.-Ф}}$ гораздо более значительное, чем в случае значений энергии E_0 . Так, для $\alpha = 8/7$ имеем $\chi_{\text{проб}}(0) = 1,19$, в то время как $\chi_{\text{Т.-Ф}}(0) = 1$ (такая ситуация является типичной для вариационного метода, сравнить с 8.22).

11.22. Записав электростатический потенциал атома в виде $\varphi = Z/r + \varphi_{эл}$, где $\varphi_{эл}(r)$ — потенциал, создаваемый электронами, и воспользовавшись соотношением

$$n(r) = -\rho_{эл}(r) = (2\varphi)^{3/2}/3\pi^2,$$

см. (XI.1), по известным формулам электростатики находим

$$\int \rho_{эл}(r) \varphi(r) dV = -\frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \int \varphi^{5/2}(r) dV = 2U_{ee} + U_{eяд},$$

$$\frac{1}{2} \int \rho_{эл}(r) \varphi_{эл}(r) dV = -\frac{1}{8\pi} \int \left(\varphi - \frac{Z}{r}\right) \Delta \left(\varphi - \frac{Z}{r}\right) dV = U_{ee},$$

$$T = \frac{2\sqrt{2}}{5\pi^2} \int \varphi^{5/2} dV \quad (1)$$

(о выражении для кинетической энергии электронов см. формулу (2) из предыдущей задачи). Отсюда

$$E[\varphi(r)] = T + U_{eяд} + U_{ee} =$$

$$= -\frac{4\sqrt{2}}{15\pi^2} \int \varphi^{5/2}(r) dV + \frac{1}{8\pi} \int \left(\varphi - \frac{Z}{r}\right) \Delta \left(\varphi - \frac{Z}{r}\right) dV. \quad (2)$$

Варьируя $\varphi(r)$, из условия экстремальности функционала $E[\varphi(r)]$ (в данном случае — максимальности!, сравнить с предыдущей задачей) действительно приходим к уравнению Томаса — Ферми для потенциала. Далее, рассмотрев потенциал²⁰⁾

$$\varphi = (1 + \lambda) \varphi_0((1 + \lambda)r),$$

где $\varphi_0(r)$ — решение уравнения Томаса — Ферми, $|\lambda| \ll 1$, из условия экстремальности $E[\varphi(r)]$ приходим к соотношению

$$T + 4U_{ee} + U_{eяд} = 0, \quad (3)$$

а из выражений (1) имеем

$$5T + 6U_{ee} + 3U_{eяд} = 0. \quad (4)$$

Отсюда следуют как равенство $U_{eяд} = -7U_{ee}$, так и теорема вирнала для кулоновского взаимодействия.

Для вариационного расчета энергии E_0 основного состояния нейтрального атома по формуле (2) ее удобно преобразовать к виду

$$E[\varphi(r)] = -\frac{16\sqrt{2}}{15\pi} \int_0^\infty r^2 \varphi^{5/2}(r) dr - \frac{1}{2} \int_0^\infty \left[\frac{\partial}{\partial r} (r\varphi(r)) \right]^2 dr \quad (5)$$

²⁰⁾ При варьировании потенциала должно соблюдаться условие $\varphi(r) \approx Z/r$ при $r \rightarrow 0$; в противном случае, как видно из выражений (1), значение U_{ee} обращается в бесконечность.

(так как функция $\varphi = Z/r$ не имеет особенности в точке $r = 0$, то во втором из интегралов (2) можно заменить Δ на $\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r$, после чего интегрирование по частям приводит к выражению (5)). Отсюда для указанной в условии пробной функции получаем (первый интеграл подстановкой $x = \sqrt{r}$ сводится к Д1.5):

$$E(\alpha) = -\frac{7\sqrt{2}}{24} Z^{7/3} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} - \frac{2}{5} Z^{7/3} \alpha. \quad (6)$$

Максимальное значение $E(\alpha_0)$ этой величины определяет энергию основного состояния атома

$$E_{0, \text{вар}} = E(\alpha_0) = -0,771 Z^{7/3}, \quad (7)$$

при этом

$$\alpha_0 = (35/48 \sqrt{2})^{2/3} \approx 0,643$$

(в условиях задачи (7) является ограничением снизу для истинного значения E_0 в модели Томаса — Ферми, равного $E_0 = -0,769 Z^{7/3}$, сравнить с результатом предыдущей задачи).

В заключение заметим, что рассмотренная пробная функция воспроизводит с высокой точностью не только значение E_0 , но и универсальную функцию $\chi(x)$ модели Томаса — Ферми. Сравнение $\chi_{\text{проб}} = (1 + \bar{\alpha}x)^{-2}$; $x = Z^{1/3}r/b$, $\bar{\alpha} = \alpha_0 b \approx 0,569$ с точной функцией $\chi_{\text{Т.-Ф}}$ проведено в таблице

x	0	0,5	1,0	2,0	5,0
$\chi_{\text{Т.-Ф}}(x)$	1	0,607	0,424	0,243	0,079
$\chi_{\text{проб}}(x)$	1	0,606	0,406	0,219	0,068

Различие их особенно мало в области $x \leq 1$, где сосредоточено наибольшее число электронов; с ростом x отношение $\chi_{\text{проб}}/\chi_{\text{Т.-Ф}}$ убывает. Это связано с тем, что рассматриваемая пробная функция $n = (2\varphi)^{3/2}/3\pi^2$ нормирована на число электронов, равное

$$\frac{\sqrt{2}}{3\alpha_0^{3/2}} Z = \frac{32}{35} Z,$$

меньшее Z ; сравнить с предыдущей задачей.

11.23. Для термов молекулярного иона водорода H_2^+ с квантовым числом Λ проекция орбитального момента электрона на направление оси, проходящей через ядра — протоны, может принимать лишь значения $m = \pm\Lambda$. Поэтому волновые функции

таких термов могут быть записаны в виде следующего разложения по шаровым функциям:

$$\Psi_m(r, \theta, \varphi) = \sum_{L \geq \Lambda} R_{L\Lambda}(r) Y_{Lm}(\theta, \varphi) = R(r, \theta) e^{im\varphi}, \quad (1)$$

где r, θ, φ — сферические координаты с полярной осью, направленной вдоль оси симметрии иона, и началом системы координат в центре отрезка, соединяющего ядра.

Для Σ -термов (у которых $m = \Lambda = 0$) волновая функция (1) при отражении координат электрона в плоскости, проходящей через ось симметрии иона, не изменяется (при таком преобразовании координаты r и θ остаются неизменными, а от φ в. ф. не зависит, так как $m = 0$). Это означает, что Σ -состояния являются Σ^+ -термами, а Σ^- -термов у иона H_2^+ не существует, что является специфическим свойством одноэлектронной системы.

В. ф. терма (1) должна быть собственной функцией оператора \hat{I} отражения координат электрона относительно точки $r = 0$, коммутирующего с гамильтонианом системы. Так как при этом $\hat{I} Y_{Lm} = (-1)^L Y_{Lm}$, то сумма в (1) включает либо лишь четные значения L , либо только нечетные L . В первом случае в. ф. (1) соответствует *четным* термам с квантовыми числами Λ_g , а во втором — *нечетным* термам Λ_u (напомним, что классификация термов двухатомной молекулы на четные и нечетные возникает в случае одинаковых зарядов ядер молекулы и связана с поведением в. ф. терма при отражении координат только лишь электронов, см. [1, § 78]).

Итак, возможные термы иона:

$${}^2\Sigma_g^+, {}^2\Sigma_u^+, {}^2\Pi_g, {}^2\Pi_u, {}^2\Delta_g, {}^2\Delta_u, \dots$$

11.24. Все четыре указанные в условии в. ф. не изменяются при повороте системы координат вокруг оси, параллельной вектору \mathbf{n}_0 и проходящей через точку $r = 0$. Поэтому все они описывают состояния с проекцией $m = \Lambda = 0$ суммарного орбитального момента электронов на эту ось, т. е. Σ -состояния.

Далее, приведенные в. ф. имеют определенную четность по отношению к инверсии координат электронов: в. ф. а) и в) являются четными, т. е. описывают Σ_g -состояния, а нечетные в. ф. б) и г) описывают Σ_u -состояния (сравнить с предыдущей задачей).

Наконец, при отражении координат электронов в плоскости, проходящей через указанную выше ось, в. ф. а) и б) не изменяются, т. е. отвечают Σ^+ -состояниям, а меняющие знак в. ф. в) и г) описывают Σ^- -состояния.

Таким образом, имеем следующую классификацию рассматриваемых состояний:

$$а) \Sigma_g^+, б) \Sigma_u^+, в) \Sigma_g^-, г) \Sigma_u^-$$

(их мультиплетность — 1 или 3 — определяется значением S суммарного спина электронов, зависящим от симметрии координатных в. ф. $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ по отношению к перестановке координат электронов).

11.25. Основным физическим обстоятельством в квантовой механике молекулы является малость отношения

$$m/M \sim 10^{-4} \div 10^{-3}$$

(m — масса электрона, а M — приведенная масса ядер), которая и обуславливает значительные различия порядков величин, перечисленных в условии задачи.

а) Линейные размеры молекулы $a_{\text{мол}}$ и расстояния $a_{\text{яя}}$ между ядрами в ней имеют такой же порядок величины, как и линейные размеры $a_{\text{ат}}$ области локализации валентных (внешних) электронов в атоме:

$$a_{\text{мол}} \sim a_{\text{яя}} \sim a_{\text{ат}} \sim a_{\text{В}} = \hbar^2/me^2.$$

Характерные значения энергий валентных электронов в атоме и в молекуле, как и разности соседних электронных термов молекулы при «закрепленных» ядрах, равны по порядку величины $E_{\text{эл}} \sim \hbar^2/ma_{\text{В}}^2$. Характерные же значения интервалов между колебательными и вращательными уровнями молекулы для одного и того же электронного терма имеют существенно меньший порядок

$$E_{\text{кол}} \sim \hbar\omega_{\text{кол}} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} E_{\text{эл}},$$

$$E_{\text{вр}} \sim \frac{\hbar^2}{I} \sim \frac{\hbar^2}{Ma_{\text{В}}^2} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} E_{\text{кол}} \sim \frac{m}{M} E_{\text{эл}}.$$

Колебательные уровни молекулы $E_{\text{кол}, v} = \hbar\omega_{\text{кол}}(v + 1/2)$ — уровни осциллятора с массой M и коэффициентом упругости k , порядок величины которого из соображений размерности определяется соотношением $ka_{\text{В}}^2 \sim \hbar^2/ma_{\text{В}}^2$, а $\omega_{\text{кол}} = \sqrt{k/M}$. Вращательные уровни молекулы $E_{\text{вр}, K} = \hbar^2K(K + 1)/2I$ — уровни сферического ротатора с моментом инерции $I = MR_0^2$, где R_0 — равновесное расстояние между ядрами, $R_0 \sim a_{\text{В}}$ (фактически в случае термов $\Lambda \neq 0$ вращение молекулы моделируется симметричным волчком).

б) Оценка амплитуды колебаний ядер из соотношения $E_{\text{кол}} \sim ka_{\text{кол}}^2$ дает

$$a_{\text{кол}} \sim (m/M)^{1/4} a_{\text{В}} \ll a_{\text{В}}.$$

в) Характерные периоды различных движений в молекуле:

$$\tau_{\text{эл}} \sim a_{\text{В}}/v_{\text{эл}} \sim ma_{\text{В}}^2/\hbar, \quad \tau_{\text{кол}} \sim \omega_{\text{кол}}^{-1} \sim \left(\frac{M}{m}\right)^{1/2} \tau_{\text{эл}},$$

$$\tau_{\text{вр}} \sim a_{\text{В}}/v_{\text{яд. вр}} \sim a_{\text{В}} (M/E_{\text{вр}})^{1/2} \sim \frac{M}{m} \tau_{\text{эл}}.$$

Различные порядки этих периодов обуславливают применимость адиабатического приближения (см. § 6 главы 8), согласно которому энергетические уровни молекулы представляются в виде

$$E = E_{\text{эл}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{вр}},$$

причем $E_{\text{вр}} \ll E_{\text{кол}} \ll E_{\text{эл}}$.

11.26. Энергия основного состояния молекулы равна

$$E_0 = E_{\text{эл}, 0} + E_{\text{кол}, 0} = E_0(R_0) + \frac{1}{2} \hbar \omega_{\text{кол}}. \quad (1)$$

Здесь $E_0(R)$ — основной терм, R_0 — равновесное расстояние между ядрами, $\omega_{\text{кол}} \equiv \omega_e = \sqrt{E_0''(R_0)/M}$, M — приведенная масса ядер; ротационная постоянная молекулы $B_e = \hbar^2/2MR_0^2$.

Так как при замене ядер молекулы их изотопами зависимость $E_0(R)$ и значение R_0 остаются неизменными, то с учетом соотношения $m_d \approx 2m_p$ находим

$$(\hbar\omega_e)_{\text{HD}} \approx \frac{\sqrt{3}}{2} (\hbar\omega_e)_{\text{H}_2} = 0,46 \text{ эВ},$$

$$(\hbar\omega_e)_{\text{D}_2} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} (\hbar\omega_e)_{\text{H}_2} = 0,38 \text{ эВ};$$

$$(B_e)_{\text{HD}} \approx \frac{3}{4} (B_e)_{\text{H}_2}, \quad (B_e)_{\text{D}_2} \approx \frac{1}{2} (B_e)_{\text{H}_2}.$$

Энергия диссоциации молекулы

$$I_0 = E_1^{(0)} + E_2^{(0)} - E_0,$$

где $E_{1,2}^{(0)}$ — основные уровни соответствующих атомов водорода с учетом конечности массы их ядер²¹⁾

$$E^{(0)} \approx -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \left(1 - \frac{m_e}{M_{\text{яд}}}\right) = -13,60 \left(1 - \frac{m_e}{M_{\text{яд}}}\right) \text{ эВ}.$$

²¹⁾ См. подстрочное примечание в решении задачи 11.30.

По приведенным формулам получаем

$$(I_0)_{\text{HD}} \approx 4,50 \text{ эВ}, \quad (I_0)_{\text{D}_2} \approx 4,54 \text{ эВ}.$$

Эффект изотопического смещения уровней в атоме водорода имеет величину порядка $(\Delta E/E)_{\text{ат}} \sim m_e/M_{\text{яд}} \sim 10^{-3}$, а в молекуле составляет

$$(\Delta E/E)_{\text{мол}} \sim \sqrt{m_e/M_{\text{яд}}} \sim 1/40,$$

при этом в молекуле он наиболее ярко проявляется в изменении частоты колебаний ядер $\omega_{\text{кол}}$.

11.27. Ограничения на возможные значения орбитального момента K молекулы при фиксированном значении суммарного ядерного спина возникает по той причине, что волновая функция системы тождественных частиц (в данном случае — ядерной подсистемы в молекулах H_2 и D_2) должна обладать определенной симметрией по отношению к перестановке переменных (спиновых и координатных) любых двух частиц. Учитывая, что спиновая в. ф. системы двух спинов величины ²²⁾ i при значениях суммарного спина $I = 2i, 2i - 2, \dots$ симметрична по отношению к перестановке спиновых переменных, а при $I = 2i - 1, 2i - 3, \dots$ антисимметрична (см. 3.30), а также характер симметрии в. ф. для тождественных бозонов и фермионов, заключаем, что при перестановке пространственных переменных ядер волновая функция молекулы не изменяется при четном значении ядерного спина ($I = 0$ у H_2 и $I = 0; 2$ у D_2) и меняет знак при нечетном I . Подчеркнем, что это заключение, как и окончательный результат о возможных значениях момента K относятся к любой двухатомной молекуле с $\Lambda = 0$ и тождественными ядрами. Выясним, к каким ограничениям на значения K приводит отмеченное обстоятельство.

Для рассматриваемых молекул с $\Lambda = 0$ зависимость волновой функции от ядерных координат определяется выражением

$$\Psi_{KMn \Lambda=0} = \Psi_{n \Lambda=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{R}) \psi_{\text{кол}}(R) Y_{KM}(\theta, \varphi). \quad (1)$$

Здесь Y_{KM} — шаровая функция; θ, φ — полярный и азимутальный углы радиуса-вектора $\mathbf{R} = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1 \equiv R\mathbf{n}$ взаимного расстояния ядер; $\Psi_{n \Lambda=0}$ — в. ф. электронного Σ -терма молекулы; $\psi_{\text{кол}}(R)$ — в. ф. колебательного движения ядер. При перестановке координат ядер, т. е. при преобразовании $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$, колебательная часть в. ф. не изменяется, а шаровая функция умножается на $(-1)^K$.

²²⁾ Спины ядер обычно обозначаются буквами i, J .

Более тонким является вопрос о преобразовании в. ф. $\Psi_{n \Lambda=0}$ электронного терма. Эта функция является скаляром (или псевдоскаляром, в зависимости от квантовых чисел терма), зависящим лишь от векторов r_1, r_2 и R . Наиболее общий вид такой функции

$$\Psi_{n \Lambda=0} = \Psi(r_1, r_2, R, r_1 R, r_2 R, r_1 r_2, [r_1 r_2] R) \quad (2)$$

(она не изменяется при вращении электронной подсистемы вокруг оси, проходящей через вектор R , как и требуется для терма с $\Lambda = 0$). При отражении координат электронов в плоскости, проходящей через вектор R , имеем

$$\begin{aligned} \hat{P}_1 \Psi_{n \Lambda=0} &\equiv \Psi(r_1, r_2, R, r_1 R, r_2 R, r_1 r_2, -[r_1 r_2] R) = \\ &= \sigma_1 \Psi(r_1, r_2, R, r_1 R, r_2 R, r_1 r_2, [r_1 r_2] R), \end{aligned} \quad (3)$$

где σ_1 равно $+1$ и -1 соответственно для *положительных* Σ^+ - и *отрицательных* Σ^- -термов. Аналогично при отражении координат электронов относительно центра отрезка, соединяющего ядра, получаем

$$\begin{aligned} \hat{P}_2 \Psi_{n \Lambda=0} &\equiv \Psi(r_1, r_2, R, -r_1 R, -r_2 R, r_1 r_2, [r_1 r_2] R) = \\ &= \sigma_2 \Psi(r_1, r_2, R, r_1 R, r_2 R, r_1 r_2, [r_1 r_2] R), \end{aligned} \quad (4)$$

где σ_2 равно $+1$ для *четных* Σ_g^- и -1 для *нечетных* Σ_u^- -термов.

Теперь замечаем, что преобразование $R \rightarrow -R$ эквивалентно произведению преобразований, выполненных в (3) и (4), т. е.

$$\hat{P}(R \rightarrow -R) = \hat{P}_1 \hat{P}_2, \text{ так что}$$

$$\hat{P} \Psi_{n \Lambda=0} = \sigma_1 \sigma_2 \Psi_{n \Lambda=0}$$

и для волновой функции молекулы

$$\hat{P}(R \rightarrow -R) \Psi_{K M n \Lambda=0} = (-1)^K \sigma_1 \sigma_2 \Psi_{K M n \Lambda=0}. \quad (5)$$

В соответствии со сказанным в начале решения имеем

$$(-1)^K \sigma_1 \sigma_2 = (-1)^I. \quad (6)$$

Это соотношение определяет связь возможных значений квантовых чисел K, I, σ_1, σ_2 для двухатомной молекулы с тождественными ядрами. В частности, для молекулы водорода основной терм Σ_g^+ . При этом $\sigma_1 = \sigma_2 = +1$, так что согласно (6) у молекулы H_2 при суммарном ядерном спине $I = 0$ и у молекулы D_2 при $I = 0; 2$ возможны только четные значения орбитального момента $K = 0, 2, 4, \dots$, а при $I = 1$ — только нечетные K (возможные же значения K для молекулы HD с различными ядрами не зависят от суммарного спина ее ядер).

Теперь заметим, что из соотношений (3) и (4) следует, что для в. ф. (2) произведение преобразований $\hat{P}(\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}) \cdot \hat{P}_2$, соответствующее инверсии координат как электронов, так и ядер, эквивалентно преобразованию \hat{P}_1 и в. ф. (1) при инверсии умножается на $(-1)^{K\sigma_1}$. Этот множитель и определяет знак состояния молекулы с $\Lambda = 0$ (но уже не обязательно с тождественными ядрами!). Соответственно для Σ^+ - (Σ^- -)термов состояния молекулы с четным (нечетным) моментом K являются *положительными*, а при нечетном (четном) K — *отрицательными*²³).

Сделаем несколько заключительных замечаний. Прежде всего обсудим вопрос о значениях орбитального момента ядер. Он не совпадает со значением K вращательного момента молекулы и, более того, не имеет определенного значения, как и орбитальный момент электронов. Однако для Σ -термов молекулы с одинаковыми ядрами все его возможные значения $L_{\text{яд}}$ имеют одинаковую четность, так что $(-1)^{L_{\text{яд}}} = (-1)^I$; при этом соотношение (6) связывает значения $L_{\text{яд}}$ с квантовыми числами K, σ_1, σ_2 . Так, для Σ_g^+ - и Σ_u^- -термов имеем $L_{\text{яд}} = K, K \pm 2, \dots$. С определенным значением величины $(-1)^{L_{\text{яд}}}$ (для двухатомных молекул с одинаковыми ядрами), отвечающим инвариантности гамильтониана по отношению к взаимной перестановке координат ядер, связана классификация состояний молекулы на *симметричные относительно ядер* при $(-1)^{L_{\text{яд}}} = (-1)^K \sigma_1 \sigma_2 = +1$ и *антисимметричные* при $(-1)^{L_{\text{яд}}} = (-1)^K \sigma_1 \sigma_2 = -1$ (напомним, что множитель $(-1)^{K\sigma_1} = (-1)^{J\sigma_2}$ определяет *знак* молекулярного уровня).

Установленное ограничение (6) на возможную величину вращательного момента молекулы K при различной четности суммарного спина ядер I приводит к зависимости молекулярных уровней от I за счет различных значений вращательной энергии (даже в отсутствие спиновых слагаемых в гамильтониане). В этом проявляется обменное взаимодействие ядер. Однако ввиду малости вращательной энергии ($\sim m_e/M_{\text{яд}}$) оно значительно слабее обменного взаимодействия электронов в атоме. Так, для соответствующих уровней $E_{I,K}$ ортоводорода ($I = 1$) и параводорода ($I = 0$) имеем

$$E_{I=1, K+1} - E_{I=0, K} = 2B_e (K + 1) = 0,015 (K + 1) \text{ эВ},$$

здесь $K = 0, 2, 4, \dots$ (значение ротационной постоянной для молекулы H_2 см. в 11.26).

²³) Не путать *знак* молекулярного уровня со знаками $+$ и $-$ электронных термов $\Sigma^\pm I$.

11.28. Решение у. Ш. для частицы в совместном поле двух потенциалов нулевого радиуса, локализованных в точках $\mathbf{r}_{1,2}$, при значениях энергии $E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m < 0$ имеет вид ²⁴⁾

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = \frac{c_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} e^{-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} + \frac{c_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} e^{-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|}. \quad (1)$$

Граничные условия для в. ф. при $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_{1,2}$, определяющие потенциалы нулевого радиуса, дают (см. 4.10)

$$(\kappa - \alpha_1) R c_1 = e^{-\kappa R} c_2, \quad e^{-\kappa R} c_1 = (\kappa - \alpha_2) R c_2, \quad (2)$$

здесь $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Условие совместности этой системы уравнений относительно $c_{1,2}$ приводит к уравнению для спектра $E(R)$, моделирующего электронные термы молекулярного иона:

$$(\kappa - \alpha_1)(\kappa - \alpha_2) = \frac{1}{R^2} e^{-2\kappa R}. \quad (3)$$

Рассмотрим некоторые следствия этого уравнения.

1) В случае $\alpha_{1,2} > 0$ в каждом из потенциалов в отдельности существуют связанные состояния (отрицательные атомные ионы) с энергиями $E_{1,2}^{(0)} = -\hbar^2 \alpha_{1,2}^2 / 2m$. При совместном дей-

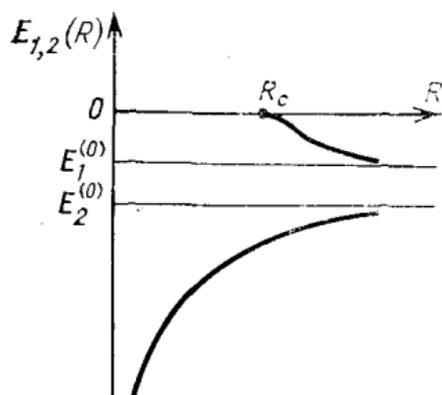


Рис. 39

ствии потенциалов состояния с $E(R) < 0$, соответствующие термам молекулярного иона (очевидно, это Σ^+ -термы, так как в. ф. (1) не изменяется при вращении вокруг оси, проходящей через вектор \mathbf{R}), обладают следующими свойствами. При $R \rightarrow \infty$ таких состояний два, причем для них $E_{1,2}(R) \rightarrow E_{1,2}^{(0)}$, а их в. ф. в случае $\alpha_1 \neq \alpha_2$ локализованы на каждом из центров в отдельности. При уменьшении R более низкий терм понижается, причем для него $E(R) \rightarrow -\infty$ при $R \rightarrow 0$, а более высокий терм идет вверх и при $R = R_c = (\alpha_1 \alpha_2)^{-1/2}$ выходит в непрерывный спектр, см. рис. 39. Понижение терма с уменьшением R (притяжение) указывает на существование устойчивого иона $(AB)^-$. При этом в рассматриваемой модели равновесное расстояние между ядрами $R_0 = 0$ и $E(R_0) = -\infty$ (т. е. возникает «падение» на центр). Это означает, что истинные значения этих вели-

²⁴⁾ Сравнить с 4.10. Заметим, что аналогичная (1) суперпозиция определяет вид решения для связанных состояний частицы при произвольном числе потенциалов нулевого радиуса (это следует из интегральной формы уравнения Шрёдингера, см. 4.20).

чин существенно зависят от вида потенциала на атомных расстояниях. В связи с этим подчеркнем, что аппроксимация взаимодействия электрона с атомом потенциалом нулевого радиуса действия оправдана лишь в случае, когда энергия связи электрона в атомном ионе $|E_0| \ll \hbar^2/ma_B^2$, а область локализации его в. ф. $\sim \kappa^{-1} = \alpha^{-1} \gg a_B$. Второй, повышающийся с уменьшением R электронный терм соответствует отталкивательному взаимодействию и не приводит к образованию устойчивого молекулярного иона.

В случае $\alpha_1 = \alpha_2 \equiv \alpha$ из (2) и (3) видно, что для рассматриваемых термов $c_1 = \pm c_2$, так что они имеют определенную четность, т. е. являются Σ_g^+ - и Σ_u^+ -термами. Для разности их энергий при $R \rightarrow \infty$ из (3) получаем

$$E_u(R) - E_g(R) \approx \frac{2\hbar^2\alpha}{mR} e^{-\alpha R} \quad (4)$$

(при этом в правой части уравнения (3) можно положить $\kappa = \alpha$, так что $(\kappa_{g,u} - \alpha) \approx \pm e^{-\alpha R}/R$, а $\Delta E \approx \hbar^2\alpha \Delta\kappa/m$).

2) В случае $\alpha_1 > 0$, $\alpha_2 < 0$ существует лишь один устойчивый атомный ион. Согласно (3) при этом имеется также лишь один терм с $E(R) < 0$, причем для него, как и в предыдущем случае, $E(R) \rightarrow E_1^{(0)}$ при $R \rightarrow \infty$ и $E(R) \rightarrow -\infty$ при $R \rightarrow 0$.

3) Наконец в случае $\alpha_{1,2} < 0$ устойчивые атомные ионы не существуют. Однако для электрона в поле двух атомов, находящихся на расстоянии $R < R_c = (\alpha_1\alpha_2)^{-1/2}$, уже возникает связанное состояние. При этом $E(R_c) = 0$ и $E(R)$ с уменьшением R понижается, причем $E(R) \rightarrow -\infty$ при $R \rightarrow 0$. Это указывает на возможность существования устойчивого молекулярного иона. Однако этот вывод обоснован лишь в случае $R_c \gg a_B$. Если же $R_c \leq a_B$, то рассмотрение, основанное на модели потенциалов нулевого радиуса, является уже несостоятельным (так, взаимодействие частицы с непроницаемой сферой радиуса a при значениях энергии $E \ll \hbar^2/ma^2$ может быть аппроксимировано потенциалом нулевого радиуса с $\alpha = -1/a$; вывод же о существовании связанного состояния в поле двух непроницаемых сфер, конечно, ошибочен).

11.29. Среднее значение гамильтониана электрона при «закрепленных» ядрах иона

$$\hat{H}_{\text{эл}} = -\frac{1}{2} \Delta - \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} - \frac{1}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} + \frac{1}{R}$$

в состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi_{\text{проб}}(r)$, равно

$$E_0(R, \alpha) = \bar{H}_{\text{эл}} = \frac{\alpha^2}{2R^2} - [3 - 2(2 + \alpha)e^{-\alpha}] \frac{1}{R} \quad (1)$$

(так как в. ф. имеет вид «водородной» функции, то для средних значений \bar{T} и $|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|^{-1}$ можно воспользоваться известными выражениями; в частности

$$\frac{1}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} = [2 - (2 + \alpha) e^{-\alpha}] R^{-1},$$

как это следует из формулы (4) задачи 4.6, если в ней положить $r = R/2$, $a = R/\alpha$, $e = 1$ и вычесть $2/R$).

В рамках вариационного метода выражение (1) можно рассматривать как некоторое приближенное значение истинной энергии ²⁵⁾ $E_0(R)$ основного терма, причем наилучшее приближение получается после минимизации (1) по параметру α . Оптимальное значение $\alpha(R)$ из условия $\partial E_0(R, \alpha)/\partial \alpha = 0$ таково, что

$$\alpha e^\alpha / (\alpha + 1) = 2R. \quad (2)$$

При этом выражения (1) и (2) определяют зависимость $E_{0, \text{вар}}(R)$, имеющую вблизи точки R_0 абсолютного минимума вид

$$E_{0, \text{вар}}(R) = E_0(R_0) + \frac{1}{2} E_0''(R_0) (R - R_0)^2. \quad (3)$$

В результате несложного численного расчета получаем ²⁶⁾

$$E_{0, \text{вар}}(R) = -0,470 + 0,078 (R - 1,78)^2. \quad (4)$$

Согласно (4) искомые характеристики основного терма

$$E_0 = -0,47, \quad R_0 = 1,78, \quad E_{\text{кол}, 0} = \frac{1}{2} \omega_e = \\ = \sqrt{\frac{m_e E_0''(R_0)}{2m_p}} = 0,0065.$$

Эти результаты значительно отличаются от экспериментальных значений, что связано с крайне простым выбором пробной функции (отметим, что в [10] проведено более реалистичное исследование иона H_2^+ с пробными функциями в виде суперпозиции «водородных» волновых функций, связанных с каждым из ядер иона).

²⁵⁾ Более точно, к $\bar{H}_{\text{эл}}$ следовало бы добавить также малое слагаемое $\bar{I}_{\text{эл}}^2 / 2MR^2 \propto m_e / M_{\text{яд}}$, получающееся при усреднении по электронному состоянию центробежной энергии ядер, см. [1, § 82].

²⁶⁾ Расчет может быть выполнен следующим образом. Заметив, что рассматриваемым значениям R отвечают α , близкие к 1,7, по формулам (2) и (1) найдем R и $E(R)$ для трех значений α , равных 1,7; 1,725 и 1,75; после этого легко определить параметры в выражении (3).

11.30. Так как $m_\mu/m_p \approx 1/9 \ll 1$, то характерные скорости ядер много меньше скорости мюона и можно использовать адиабатическое приближение. При этом движение ядер происходит в эффективном потенциале $U(R) = E_0(R)$, определяемом энергией основного мюонного терма при «закрепленных» ядрах и имеющем такой же вид, как и в случае обычного молекулярного иона H_2^+ , если воспользоваться мюонными атомными единицами $m_\mu = e = \hbar = 1$.

В этом приближении характерный размер иона определяется расстоянием R_0 , отвечающим минимуму зависимости $E_0(R)$ и для мезомолекулярного иона составляет $R_0 \approx 2$ а. е. $= 2\hbar^2/m_\mu e^2 \approx \approx 5 \cdot 10^{-11}$ см. Значения величин ω_μ и B_μ (в мюонных атомных единицах):

$$\omega_\mu \approx 0,27 \sqrt{m_\mu/M}, \quad B_\mu = m_\mu/2MR_0^2 = m_\mu/8M, \quad (1)$$

где M — приведенная масса ядер, сравнить с 11.26.

Необходимо сделать замечание об особенностях применения адиабатического приближения для мезомолекулярных систем, связанных со значением $\chi \sim 1/10$ параметра адиабатичности, сравнить с $\chi \sim 10^{-4} \div 10^{-3}$ для обычных молекул, см. 11.25. Хотя приближение «закрепленных» ядер для вычисления $E_0(R)$ еще оправдано (но с существенно меньшей точностью), дальнейшего разделения ядерного движения на независимые колебательное и вращательное уже не происходит. Колебательное движение носит сильно ангармонический характер и существенно зависит от величины момента K , так что использование формулы адиабатического приближения для спектра

$$E_{Kv} = E_0 + \omega_\mu \left(v + \frac{1}{2} \right) + B_\mu K(K+1) \quad (2)$$

уже не оправдано. Впрочем, для состояний с $v = 0$, $K = 0$ и 1 она дает еще разумные значения энергии. Так, для $d\mu$ -системы из нее следуют значения энергии связи²⁷⁾, $\epsilon_{Kv} = -1/2 - E_{Kv}$,

²⁷⁾ Здесь в энергии основного состояния мезоатома, равной $-1/2$, не сделана поправка на конечность массы (более тяжелого) ядра, приводящая к увеличению энергии связи. Ее величина такого же порядка $\sim m_\mu/M_{яд}$, как и вклад в энергию терма от слагаемого $\bar{I}_\mu^2/2MR^2$, получающегося при усреднении по мюонному состоянию центробежной энергии ядер, см. [1, § 82]. Это слагаемое в мезомолекуле более существенно, чем в обычных молекулах и приводит к повышению терма (и уменьшению энергии связи). Таким образом, указанные неучтенные слагаемые имеют противоположные знаки и частично компенсируют друг друга.

равные $\epsilon_{00} \approx 0,059$ а. е. ≈ 330 эВ и $\epsilon_{10} \approx 0,036$ а. е. ≈ 200 эВ; сравнить с точными значениями 319 эВ и 232 эВ соответственно. Заметим, что, как показывают точные вычисления, у мезомолекулярных ионов водорода имеется по два связанных состояния ($v = 0$ и 1) с $K = 0$ и 1, одно ($v = 0$) — с $K = 2$, а устойчивых состояний с $K \geq 3$ не существует.

11.31. Запишем пробную волновую функцию в виде $\Psi_{\text{проб}} = C(\Psi_0 + \alpha \mathcal{E} \Psi_1)$, где

$$\Psi_1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \cdot \frac{(2\gamma)^{5/2}}{2\sqrt{6}} r e^{-(2\gamma r)/2}.$$

Теперь заметим, что нормированная на единицу (как и Ψ_0) функция Ψ_1 совпадает с в. ф. состояния с квантовыми числами $n = 2$, $l = 1$, $m = 0$ водородоподобного атома с зарядом ядра $Z = 2\gamma$ ($\gamma = 1$ в случае a) и поэтому удовлетворяет уравнению

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{2\gamma}{r}\right)\Psi_1 = -\frac{Z^2}{2n^2}\Psi_1 = -\frac{\gamma^2}{2}\Psi_1.$$

Соответственно записав гамильтониан системы в виде

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} + \mathcal{E}z \equiv \hat{H}_0 + \mathcal{E}r \cos \theta \quad (1)$$

(ось z направлена вдоль электрического поля), находим

$$\langle \Psi_1 | \hat{H}_0 | \Psi_1 \rangle \equiv \langle \Psi_1 | -\frac{1}{2}\Delta - \frac{2\gamma}{r} + \frac{2\gamma - 1}{r} | \Psi_1 \rangle = \frac{\gamma^2 - 1}{2} \quad (2)$$

(значение $\langle \Psi_1 | \frac{1}{r} | \Psi_1 \rangle \equiv \frac{1}{2\gamma} \langle \Psi_1 | \frac{2\gamma}{r} | \Psi_1 \rangle = \frac{\gamma}{2}$ непосредственно следует из теоремы вириала). Далее очевидно:

$$\langle \Psi_0 | \hat{H}_0 | \Psi_0 \rangle = -\frac{1}{2}, \quad \langle \Psi_0 | z | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_1 | z | \Psi_1 \rangle = 0,$$

$$\langle \Psi_1 | \hat{H}_0 | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{H}_0 | \Psi_1 \rangle = -\frac{1}{2} \langle \Psi_1 | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (3)$$

$$C^2 = (1 + \alpha^2 \mathcal{E}^2)^{-1} \approx 1 - \alpha^2 \mathcal{E}^2$$

(заметим, что в. ф. Ψ_0 и Ψ_1 взаимно ортогональны как отвечающие различным значениям орбитального момента). Наконец

$$\begin{aligned} \langle \Psi_1 | z | \Psi_0 \rangle &= \langle \Psi_0 | z | \Psi_1 \rangle = \\ &= \frac{\gamma^{5/2}}{\pi} \int e^{-(1+\gamma)r} r^4 \cos^2 \theta dr d\Omega = \frac{32\gamma^{5/2}}{(1+\gamma)^5}. \end{aligned} \quad (4)$$

Соотношения (1)–(4) позволяют найти $\bar{E}(\alpha, \gamma) = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ с точностью до членов $\sim \mathcal{E}^2$ включительно.

В случае а) имеем

$$\bar{E}(\alpha) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \alpha^2 \mathcal{E}^2 + 2\alpha \mathcal{E}^2.$$

Минимизация по параметру α дает

$$E_{0, \text{вар}} = \min \bar{E}(\alpha) = \bar{E}(\alpha_0) = -\frac{1}{2} - 2\mathcal{E}^2, \quad \alpha_0 = -2. \quad (5)$$

Сравнивая это приближенное значение энергии основного состояния атома водорода, находящегося в слабом электрическом поле, с точным $-1/2 - \beta_0 \mathcal{E}^2/2$, где β_0 — поляризуемость основного состояния атома, находим ее приближенное (вариационное) значение

$$\beta_{0, \text{вар}} = 4. \quad (6)$$

В случае б) имеем

$$\bar{E}(\alpha, \gamma) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} (1 - \gamma + \gamma^2) \alpha^2 \mathcal{E}^2 + \frac{64\gamma^{5/2}}{(1 + \gamma)^5} \alpha \mathcal{E}^2.$$

Минимизация по параметру α дает

$$\bar{E}(\gamma) = -\frac{1}{2} - \frac{2^{11}\gamma^5}{(1 + \gamma)^{10} (1 - \gamma + \gamma^2)} \mathcal{E}^2,$$

а последующая минимизация по параметру ²⁸⁾ γ позволяет найти более точное, чем в случае а), значение поляризуемости

$$\beta_{0, \text{вар}} = \frac{2^{12}\gamma_0^5}{(1 + \gamma_0)^{10} (1 - \gamma_0 + \gamma_0^2)} = 4,475, \quad (7)$$

отличающееся от точного, $\beta_0 = 9/2$, лишь на 0,6 %.

В заключение заметим, что если пробная функция выбрана таким образом, что в отсутствие электрического поля она совпадает с точной волновой функцией невозмущенного гамильтониана, то вариационный расчет поляризуемости основного состояния дает ограничение *снизу* на ее точное значение (поэтому результат (7) заведомо более точен, чем (6)).

11.32. Гамильтониан и энергия основного состояния атома водорода, находящегося в однородном электрическом поле, имеют вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}z; \quad E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(2)}, \quad E_0^{(2)} = -\frac{1}{2} \beta_0 \mathcal{E}^2,$$

²⁸⁾ Оптимальное значение γ_0 получается из условия $\partial \bar{E} / \partial \gamma = 0$, представляющего алгебраическое уравнение третьей степени относительно γ . Из него следует $\gamma_0 \sim 0,80$ (два других корня уравнения — комплексные).

причем $E_0^{(0)} = -1/2$, а $\beta_0 = \frac{9}{2} (\hbar^2/me^2)^3$. Для водородоподобного атома с зарядом ядра Ze гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + e\mathcal{E}z, \quad (1)$$

а энергия E_0 может быть получена из приведенных выше выражений с помощью замен $e \rightarrow \sqrt{Z} e$, $\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E}/\sqrt{Z}$, так что

$$E_0^{(2)} = -\frac{9}{4} \cdot \frac{a_B^3}{Z^4} \mathcal{E}^2$$

и поляризуемость такого атома $\beta_0 = 9a_B^3/2Z^4$.

Гамильтониан гелиеподобного атома в электрическом поле в пренебрежении взаимодействием между электронами равен $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, где $\hat{H}_{1,2}$ имеют вид (1). Очевидно, энергия и поляризуемость основного состояния такой системы получаются умножением на 2 соответствующих величин для водородоподобного атома с тем же зарядом ядра Z . В этом приближении

$$\beta_{0,2e}^{(0)} = 9 \frac{a_B^3}{Z^4} \approx \frac{9}{Z^4} \text{ а. е.} \quad (2)$$

Физически естественным представляется, что более точное значение поляризуемости двухэлектронного атома (иона) может быть получено в результате замены в формуле (2) заряда Z на эффективный заряд:

$$\beta_{0,2e} = \frac{9}{(Z - 5/16)^4}. \quad (3)$$

Сравнение рассчитанных значений поляризуемости с экспериментальными данными²⁹⁾ для 1^1S -состояний атома гелия и некоторых двухэлектронных ионов представлено в таблице

Ион	He	Li ⁺	Be ²⁺	B ³⁺	C ⁴⁺
Согласно (2)	0,56	0,111	0,035	$1,4 \cdot 10^{-2}$	$6,9 \cdot 10^{-3}$
Согласно (3)	1,11	0,173	0,049	$1,9 \cdot 10^{-2}$	$8,6 \cdot 10^{-3}$
Эксперим. знач.	1,36	0,196	0,054	$2 \cdot 10^{-2}$	$8,8 \cdot 10^{-3}$

²⁹⁾ Они взяты из книги: Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела, Наука, 1978, С. 480.

11.33. Невозмущенный уровень атома водорода с $n = 2$ является четырехкратно вырожденным (без учета спина электрона). Для расчета его расщепления в однородном электрическом поле воспользуемся секулярным уравнением. Соответствующие с. ф. Ψ_{nlm} невозмущенного гамильтониана перенумеруем следующим образом:

$$\Psi_1^{(0)} = \Psi_{200}, \quad \Psi_2^{(0)} = \Psi_{210}, \quad \Psi_3^{(0)} = \Psi_{211}, \quad \Psi_4^{(0)} = \Psi_{21, -1}.$$

При этом $\Psi_{2lm} = R_{2l}(r) Y_{lm}$, где

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_B^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) e^{-r/2a_B}, \quad R_{21} = \frac{r}{\sqrt{24a_B^5}} e^{-r/2a_B},$$

а шаровые функции Y_{00} , Y_{1m} приведены на стр. 36. Легко заметить, что отличны от нуля только следующие матричные элементы возмущения $V = ez\mathcal{E} = er \cos \theta \cdot \mathcal{E}$:

$$V_{12} = -V_{21} = i \frac{e\mathcal{E}}{16\pi a_B^4} \iint e^{-r/a_B} \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) \times \\ \times r^4 \cos \theta dr d\Omega = -3iea_B \mathcal{E},$$

так что секулярное уравнение, $|V_{ik} - E_2^{(1)} \delta_{ik}| = 0$, и его решение принимают вид

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} - 3iea_B \mathcal{E} & 0 & 0 & 0 \\ 3iea_B \mathcal{E} & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = E_2^{(1)2} (E_2^{(1)2} - 9e^2 a_B^2 \mathcal{E}^2) = 0,$$

$$E_{2,1}^{(1)} = 3ea_B \mathcal{E}, \quad E_{2,2}^{(1)} = -3ea_B \mathcal{E}, \quad E_{2,3}^{(1)} = E_{2,4}^{(1)} = 0. \quad (1)$$

Таким образом уровень расщепляется на три подуровня, из которых два являются невырожденными, а один — двукратно вырожденным (с учетом спина электрона эти кратности вырождения удваиваются; заметим также, что в более высоких порядках теории возмущений дальнейшего снятия вырождения не происходит — сравнить с 8.11).

Правильные функции нулевого приближения $\Psi_{\pm}^{(0)}$, отвечающие расщепленным уровням $E_{2,1(2)}^{(1)} = \pm 3ea_B \mathcal{E}$, имеют вид

$$\Psi_{\pm}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1^{(0)} \pm i\Psi_2^{(0)}).$$

В этих состояниях, не имеющих определенной четности, электрон имеет отличный от нуля средний дипольный момент, направленный

вдоль электрического поля \mathcal{E} и равный $\mp 3ea_B$. Здесь проявляется специфическое для кулоновского потенциала случайное вырождение уровней с различными значениями l и с противоположной четностью, приводящее к линейному эффекту Штарка в атоме водорода (для возбужденных уровней). Состояния же $\Psi_{3,4}^{(0)}$ с $l=1$, $l_z = \pm 1$ отвечают определенной четности и изменение их энергии в электрическом поле $\propto \mathcal{E}^2$.

Условие применимости полученного результата (1):

$$5 \cdot 10^{-5} \text{ эВ} \ll 6ea_B \mathcal{E} \ll 3 \text{ эВ}, \text{ или } 2 \cdot 10^3 \text{ В/см} \ll \mathcal{E} \ll 10^8 \text{ В/см}$$

(штарковское расщепление должно быть много большим интервала тонкой структуры, см. 11.1, но много меньшим разности энергий соседних невозмущенных уровней атома).

11.34. Записав пробную функцию в виде $\Psi_{\text{проб}} = C(\Psi_0 + \Psi_1)$, где $\Psi_1 = \lambda(\mathcal{E}r) e^{-\gamma r}$, находим матричные элементы невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 :

$$\langle \Psi_0 | \hat{H}_0 | \Psi_0 \rangle = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m}, \quad \langle \Psi_0 | \hat{H}_0 | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi_1 | \hat{H}_0 | \Psi_0 \rangle = 0,$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_1 | \hat{H}_0 | \Psi_1 \rangle &= \langle \Psi_1 | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \Psi_1 \rangle = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 \int (\nabla(\mathcal{E}r) e^{-\gamma r})^2 dV = \frac{\pi \lambda^2 \hbar^2 \mathcal{E}^2}{2m\gamma^3}, \end{aligned}$$

и возмущения $\hat{V} = -e(\mathcal{E}r)$:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{V} | \Psi_0 \rangle &= \langle \Psi_1 | \hat{V} | \Psi_1 \rangle = 0, \quad \langle \Psi_1 | \hat{V} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{V} | \Psi_1 \rangle = \\ &= -\lambda e \sqrt{\frac{\kappa_0}{2\pi}} \int \frac{1}{r} (\mathcal{E}r)^2 e^{-(\gamma + \kappa_0)r} dV = \\ &= -4 \sqrt{2\pi\kappa_0} \frac{\lambda e \mathcal{E}^2}{(\gamma + \kappa_0)^4}. \end{aligned}$$

Выбрав теперь

$$C^2 = (1 + \pi \lambda^2 \gamma^{-5} \mathcal{E}^2)^{-1} \approx 1 - \pi \lambda^2 \gamma^{-5} \mathcal{E}^2$$

из условия нормировки пробной в. ф. на единицу, имеем

$$\begin{aligned} \bar{E}(\lambda, \gamma) &= \langle \Psi_{\text{проб}} | \hat{H}_0 + \hat{V} | \Psi_{\text{проб}} \rangle \approx \\ &\approx -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} - \frac{8 \sqrt{2\pi\kappa_0} \lambda e}{(\gamma + \kappa_0)^4} \mathcal{E}^2 + \frac{\pi \lambda^2 \hbar^2 (\gamma^2 + \kappa_0^2)}{2m\gamma^5} \mathcal{E}^2. \end{aligned}$$

После минимизации по параметру λ получаем

$$\bar{E}(\gamma) = \min_{\lambda} \bar{E}(\lambda, \gamma) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} - \frac{64me^2 \kappa_0 \gamma^5}{\hbar^2 (\gamma^2 + \kappa_0^2) (\gamma + \kappa_0)^8} \mathcal{E}^2, \quad (2)$$

а последующая минимизация по параметру γ (минимум (2) достигается при $\gamma = \kappa_0$) приводит к вариационному значению энергии смещенного под действием электрического поля уровня

$$E_{0, \text{вар}} = \min \bar{E}(\lambda, \gamma) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} - \frac{me^2}{8\hbar^2 \kappa_0^4} \mathcal{E}^2 \quad (3)$$

и поляризуемости состояния

$$\beta_{0, \text{вар}} = me^2 / 4\hbar^2 \kappa_0^4 \propto \kappa_0^{-4},$$

что совпадает с точным результатом, см. следующую задачу.

11.35. Для расчета сдвига основного уровня в потенциале нулевого радиуса под влиянием возмущения $V = -e\mathcal{E}z$ удобно в качестве системы собственных функций невозмущенного гамильтониана выбрать в. ф., отвечающие также определенным значениям момента l и его проекции l_z . Так как в. ф. основного состояния

$$\Psi_0^{(0)} = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa r} / \sqrt{2\pi} r \quad (\text{его энергия } E_0^{(0)} = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m)$$

отвечает значению $l = 0$, то матричные элементы возмущения $\langle n | (-e\mathcal{E}z) | 0 \rangle$ отличны от нуля лишь для состояний $|n\rangle$ с $l = 1$ и $l_z = 0$. Потенциал нулевого радиуса не оказывает действия на частицу с моментом $l \neq 0$, поэтому с. ф. \hat{H}_0 для $l \neq 0$ совпадают с в. ф. свободной частицы, и при $l = 1, l_z = 0$ они имеют вид [1, § 33]

$$\begin{aligned} \Psi_{k10}^{(0)} &= \sqrt{\frac{k}{r}} J_{3/2}(kr) Y_{10}(\mathbf{n}) = \\ &= -i \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\cos \theta}{\pi r} \left(\frac{\sin kr}{kr} - \cos kr \right) \end{aligned} \quad (1)$$

(они нормированы так, что $\langle k'l'm' | klm \rangle = \delta(k - k') \delta_{ll'} \delta_{mm'}$).

Вычислив матричный элемент возмущения

$$\begin{aligned} \langle k10 | (-e\mathcal{E}z) | 0 \rangle &= \\ &= -i \sqrt{\frac{4\kappa}{3\pi}} \frac{e\mathcal{E}}{k} \int_0^\infty e^{-\kappa r} (\sin kr - kr \cos kr) dr = \\ &= -4i \sqrt{\frac{\kappa}{3\pi}} \frac{ek^2 \mathcal{E}}{(k^2 + \kappa^2)^2}, \end{aligned} \quad (2)$$

согласно (VIII.1) получаем (теперь $\sum'_m \rightarrow \sum_{l,m} \int_0^\infty dk$, причем в сумме

по l, m отлично от нуля лишь одно слагаемое с $l = 1, m = 0$):

$$E_0^{(2)} = - \frac{32me^2\kappa\mathcal{E}^2}{3\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{k^4 dk}{(k^2 + \kappa^2)^5} = - \frac{me^2}{8\hbar^2\kappa^4} \mathcal{E}^2. \quad (3)$$

Отсюда поляризуемость состояния

$$\beta_0 = \frac{me^2}{4\hbar^2\kappa^4}. \quad (4)$$

О приложениях этой формулы, после введения поправки на конечное значение радиуса потенциала, к иону H^- см. в следующей задаче.

11.36. Ввиду того, что в.ф. состояния с малой энергией связи с увеличением r убывает достаточно медленно, а возмущение $V = -e\mathcal{E}z$ при этом возрастает, доминирующую роль в сумме (VIII.1) второго приближения теории возмущений, определяющей сдвиг уровня, играют состояния непрерывного спектра с малой энергией $E_k \leq \hbar^2\kappa^2/m$. Действительно, для таких состояний матричные элементы возмущения $\langle k|V|0\rangle$, в которых определяющую роль играют большие расстояния $r \sim \kappa^{-1}$, особенно велики (по мере увеличения энергии их значения начинают уменьшаться из-за осцилляций в.ф.). На больших же расстояниях волновые функции рассматриваемых состояний достаточно просто связаны с в.ф. свободных частиц. Так, нормированная на единицу в.ф. невозмущенного связанного состояния с моментом $l = 0$ вне области действия потенциала лишь дополнительным множителем $C_{\kappa 0}$ отличается от в.ф. в потенциале нулевого радиуса, см. предыдущую задачу. Волновые функции непрерывного спектра для медленных частиц с моментом $l \neq 0$ на расстояниях $r > r_s$ фактически совпадают (в отсутствие возмущения) с в.ф. свободной частицы (из-за наличия центробежного барьера, мало проницаемого для медленных частиц, они не «чувствуют» потенциала центра) и описываются формулой (1) из предыдущей задачи.

С учетом высказанных соображений очевидно, что сдвиг и поляризуемость мелкого s -уровня в короткодействующем потенциале определяются непосредственно формулами предыдущей задачи для потенциала нулевого радиуса введением в них дополнительного множителя $C_{\kappa 0}^2$; так, поляризуемость описывается выражением

$$\beta_0 = \frac{me^2}{4\hbar^2\kappa^4} C_{\kappa 0}^2. \quad (1)$$

Подчеркнем, что отмеченная выше доминирующая роль больших расстояний в матричных элементах $\langle k|e\mathcal{E}z|0\rangle$ для состояний

с малой энергией в случае мелкого s -уровня (наглядно видная из формул (2) и (3) предыдущей задачи) проявляется в расходимости выражений для $E_0^{(2)}$ и β_0 при $\kappa \rightarrow 0$.

Сделаем несколько заключительных замечаний.

1) для s -состояния частицы с малой энергией связи в короткодействующем потенциале два параметра, κ и $C_{\kappa 0}^2$, определяют большинство его физических свойств, проявляющихся во влиянии на него внешних электрических и магнитных полей (см. 11.46 и 11.66). Они же определяют и рассеяние медленных частиц, $\kappa r_S \ll 1$, на этом потенциале. В приближении эффективного радиуса (см. [1, § 133], а также задачи § 3 главы 13)

$$k \operatorname{ctg} \delta_0 = -\frac{1}{a_0} + r_0 \frac{k^2}{2},$$

при этом параметры низкоэнергетического s -рассеяния — длина рассеяния a_0 и эффективный радиус взаимодействия r_0 — связаны с κ и $C_{\kappa 0}^2$ соотношениями

$$a_0 = \frac{2C_{\kappa 0}^2}{\kappa(1 + C_{\kappa 0}^2)}, \quad r_0 = \frac{C_{\kappa 0}^2 - 1}{\kappa C_{\kappa 0}^2} \quad (2)$$

(для потенциала нулевого радиуса $C_{\kappa 0}^2 = 1$ и $r_0 = 0$).

2) В отрицательных атомных ионах внешний электрон с известной точностью может рассматриваться как находящийся в короткодействующем потенциале нейтрального атома. На основе такого подхода (без какой-либо детализации состояний «внутренних» электронов!) можно описать свойства иона, определяемые этим внешним электроном. Для иона H^- , воспользовавшись значениями $\kappa = 0,235$ а. е. (энергия связи электрона 0,754 эВ) и $C_{\kappa 0}^2 = 2,65$, согласно (1) находим $\beta_0 = 216$; сравнить с результатом вариационного расчета $\beta_0 = 206$. См. также 13.40 о рассеянии медленных электронов на атомах водорода.

3) Отметим, что доминирующая роль больших расстояний в значениях поляризуемости состояний с малой энергией связи сохраняется как при $l = 1$ (при этом $\beta_{l=1} \propto \kappa^{-3}$, см. следующую задачу), так и для $l = 2$ ($\beta_{l=2} \propto \kappa^{-1}$). Для больших значений момента поляризуемость определяется уже расстояниями $r \leq r_S$ и зависит от конкретного вида потенциала и волновой функции на таких расстояниях, при этом порядок ее величины

$$\beta_l \geq 3 \sim me^2 r_S^4 / \hbar^2.$$

Отмеченный характер зависимости поляризуемости от значения момента связан с уменьшением проницаемости центробежного барьера с увеличением l .

11.37. Расчет поляризуемости аналогичен проведенному в двух предыдущих задачах. Теперь волновая функция невозмущенного связанного состояния вне области действия потенциала, при $r > r_s$, имеет вид (для $l = 1$):

$$\Psi_{\kappa l m}^{(0)} = 2\kappa C_{\kappa l} \frac{1}{\sqrt{\pi r}} K_{l+1/2}(\kappa r) Y_{lm}(\mathbf{n}), \quad (1)$$

где K_ν — функция Макдональда, $C_{\kappa l}$ — асимптотический коэффициент³⁰⁾, являющийся, как и энергия $E_l^{(0)} = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$, важной характеристикой состояния частицы. Как и в 11.36, в качестве волновых функций состояний непрерывного спектра можно выбрать в. ф. свободных частиц³¹⁾

$$\Psi_{klm}^{(0)} = \sqrt{\frac{k}{r}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(\mathbf{n}). \quad (2)$$

Приведенные в. ф. совпадают с точными лишь на больших расстояниях $r > r_s$ (вне области действия потенциала). Однако матричные элементы возмущения $\langle klm | -e\mathcal{E}z | \kappa l m \rangle$ при $k \leq \kappa$ определяются именно большими расстояниями $r \sim 1/\kappa$. При вычислении матричного элемента $\langle klm | z | \kappa l m \rangle$ интегрирование по углам проводится элементарно, а значения радиальных интегралов, имеющих вид

$\int_0^\infty r^2 K_{3/2}(\kappa r) J_\nu(kr) dr$, приведены в [33, с. 707].

³⁰⁾ Асимптотика в. ф.

$$\Psi_{\kappa l m}^{(0)} \approx \sqrt{2\kappa} C_{\kappa l} e^{-\kappa r} Y_{lm} / r$$

при $r \rightarrow \infty$. Как и в случае $l = 0$, асимптотический коэффициент связан с параметрами низкоэнергетического рассеяния частицы с моментом l , определяющими разложение эффективного радиуса

$$k^{2l+1} \operatorname{ctg} \delta_l \approx -\frac{1}{a_l} + r_l \frac{k^2}{2},$$

соотношением

$$C_{\kappa l}^{-2} = -r_l \kappa^{1-2l} + (-1)^l (2l+1) + O((\kappa r_s)^{3-2l}).$$

При этом $r_l < 0$ и $C_{\kappa l}^2 \propto \kappa^{2l-1}$ при $\kappa \rightarrow 0$ для значений момента $l \geq 1$.

³¹⁾ Для медленных частиц, $kr_s \ll 1$, в. ф. непрерывного спектра при произвольном значении момента l вне области действия потенциала существенно отличаются от волновых функций свободной частицы лишь в резонансной волне, см. § 3 главы 13 (в данной задаче это p -волна). Однако для резонансной волны матричный элемент возмущения в рассматриваемой задаче равен нулю.

Для связанных состояний частицы с $l = 1$ и проекцией момента на направление электрического поля $l_z = \pm 1$ отличен от нуля лишь один матричный элемент возмущения, для которого

$$|\langle k, 2, \pm 1 | z | \kappa, 1, \pm 1 \rangle|^2 = \frac{16C_{\kappa 1}^2 k^6}{5\pi\kappa (k^2 + \kappa^2)^4}.$$

Соответственно сдвиг уровня во втором порядке теории возмущений оказывается равным

$$E_{1, \pm 1}^{(2)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{|\langle k, 2, \pm 1 | e\mathcal{E}z | \kappa, 1, \pm 1 \rangle|^2}{k^2 + \kappa^2} dk = -\frac{me^2 C_{\kappa 1}^2}{8\hbar\kappa^4} \mathcal{E}^2,$$

так что поляризуемость таких состояний

$$\beta_{1, \pm 1} = \frac{me^2 C_{\kappa 1}^2}{4\hbar\kappa^4} \propto \kappa^{-3} \quad (3)$$

(напомним, что $C_{\kappa 1}^2 \propto \kappa$, см. примечание на с. 588).

Для состояния с $l = 1$ и $l_z = 0$ отличны от нуля уже два матричных элемента возмущения, отвечающих значениям момента $l = 2$ и $l = 0$, для которых

$$|\langle k 00 | z | \kappa 10 \rangle|^2 = \frac{4C_{\kappa 1}^2 k^2 (k^2 + 3\kappa^2)^2}{3\pi\kappa (k^2 + \kappa^2)^4},$$

$$|\langle k 20 | z | \kappa 10 \rangle|^2 = \frac{64C_{\kappa 1}^2 k^6}{15\pi\kappa (k^2 + \kappa^2)^4}.$$

Вычисление интегралов, аналогичных для $E_{1, \pm 1}^{(2)}$, позволяет найти изменение энергии рассматриваемого состояния и его поляризуемость, которая оказывается равной

$$\beta_{1, 0} = 7\beta_{1, \pm 1} \quad (4)$$

(в состоянии с $l_z = 0$ область локализации частицы более «вытянута» в направлении электрического поля, чем в состояниях с $l_z = \pm 1$, так что оно оказывает на частицу более существенное влияние).

11.38. Характерной особенностью рассматриваемых состояний, определяющей большие значения их поляризуемостей, является близость 2S- и 2P-уровней гелиеподобных атомов (ионов). Соответственно в сумме (VIII.1) для сдвига уровня под влиянием возмущения $V = (z_1 + z_2)\mathcal{E}$ во втором порядке доминирующую роль играет одно слагаемое, так что

$$E_{2S}^{(2)} = -\frac{1}{2} \beta (2S) \mathcal{E}^2 \approx |\langle 2P, L_z = 0 | (z_1 + z_2) | 2S \rangle|^2 \frac{\mathcal{E}^2}{E_{2S}^{(0)} - E_{2P}^{(0)}} \quad (1)$$

(символ мультиплетности пока опущен).

В состояниях $2S$ и $2P$ один из электронов находится в основном $1s$ -, а другой — в возбужденном $2s$ - или $2p$ -состояниях. Так как «возбужденный» электрон находится в среднем на существенно больших расстояниях от ядра, чем «невозбужденный», то для вычисления матричного элемента возмущения в формуле (1) можно воспользоваться следующими приближенными выражениями для волновых функций (одинаковыми как для синглетных, так и для триплетных состояний):

$$\Psi_{2S} \approx \psi_{1s}(r_1, Z) \psi_{2s}(r_2, Z-1), \quad \Psi_{2P} \approx \psi_{1s}(r_1, Z) \psi_{2p}(r_2, Z-1) \quad (2)$$

(эти в. ф. не имеют определенной симметрии, что соответствует пренебрежению обменными эффектами). Одночастичные волновые функции в выражениях (2) — соответствующие кулоновские в. ф., причем для «возбужденного» электрона заряд ядра выбран равным $Z-1$, что отражает его частичную экранировку $1s$ -электроном, сравнить с 11.9. Воспользовавшись известными выражениями для кулоновских в. ф., находим матричный элемент возмущения

$$|\langle 2P, L_z = 0 | z_1 + z_2 | 2S \rangle| \approx \frac{3}{Z-1}$$

(вклад в него вносит лишь 2-й, «возбужденный» электрон) и согласно (1) получаем

$$\beta(2S) = \frac{18}{(Z-1)^2 (E_{2P}^{(0)} - E_{2S}^{(0)})}. \quad (3)$$

Воспользовавшись теперь экспериментальными значениями для разности энергий $2S$ - и $2P$ -состояний, приведенными в условии задачи, находим значения поляризуемостей

$$\begin{aligned} \beta_{\text{He}}(2^3S) &= 428, & \beta_{\text{He}}(2^1S) &= 813; \\ \beta_{\text{Li}^+}(2^3S) &= 54, & \beta_{\text{Li}^+}(2^1S) &= 95. \end{aligned}$$

В заключение отметим, что аналогичная близость энергетических уровней является типичной для многих атомных систем и объясняет большие численные значения их поляризуемостей. Так, для основного 2^2S -состояния атома лития $E_{2S} = 5,39$ эВ, а для возбужденного 2^2P -состояния $E_{2P} = 3,54$ эВ. Оценка поляризуемости согласно формуле (3) с заменой в ней $Z-1$ на $Z-2$ (из-за наличия двух $1s$ -электронов) дает $\beta_{\text{Li}} \approx 265$ а.е. (экспериментальное значение составляет 162; основная причина более завышенного значения β согласно (3) связана с рассмотрением «возбужденного» электрона как движущегося в поле заряда ядра, экранированного на 2 двумя $1s$ -электронами: для

атома лития экранировка проявляется не так сильно, что видно из значения поправки Ридберга $\Delta_S = -0,40$).

11.39. Для оценки поляризуемости томас-фермиевских (т.-ф) электронов $\beta_{т.-ф}$, определяющей их индуцированный электрическим полем дипольный момент $\mathbf{d} = \beta_{т.-ф} \mathcal{E}$, заметим, что хотя приведенное соотношение строго справедливо лишь для достаточно слабого поля, оно тем не менее дает правильный порядок величины d и в случае сильных полей. Но при значениях напряженности поля $\mathcal{E} \sim \mathcal{E}_{т.-ф}$ (здесь $\mathcal{E}_{т.-ф} \sim Ze/r_{т.-ф}^2$ — характерное значение напряженности атомного электрического поля в области $r \sim r_{т.-ф} \sim a_B/Z^{1/3}$, где в основном локализованы т.-ф электроны) смещения электронов под действием внешнего поля будут порядка $r_{т.-ф}$, так что при этом $d \sim Zert.-ф$ и

$$\beta_{т.-ф} = \frac{d}{\mathcal{E}} \sim \frac{Zer_{т.-ф}}{Ze/r_{т.-ф}^2} = r_{т.-ф}^3 \sim a_B^3/Z = Z^{-1} \text{ а. е.} \quad (1)$$

Для оценки числового значения коэффициента в полученной зависимости $\beta_{т.-ф} = \gamma/Z$ рассмотрим статистическую модель атома в пренебрежении взаимодействием между электронами, сравнить с 11.19. Теперь при наличии слабого электрического поля в соотношении $n(\mathbf{r}) = \rho_0^3(\mathbf{r})/3\pi^2$ для $\rho_0(\mathbf{r})$ имеем

$$\begin{aligned} \rho_0(\mathbf{r}) &= \left[2 \left(\frac{Z}{r} - \mathcal{E}r - \frac{Z}{R} \right) \right]^{1/2} \approx \\ &\approx \left[2 \left(\frac{Z}{r} - \frac{Z}{R} \right) \right]^{1/2} \left(1 - \frac{rRr\mathcal{E}}{2Z(R-r)} \right). \end{aligned}$$

Соответственно

$$n(\mathbf{r}) \approx n_0(r) \left(1 - \frac{3rRr\mathcal{E}}{2Z(R-r)} \right),$$

где $n_0(r) = 2Z^2(1-x)^{3/2}/9\pi^2x^{3/2}$ — электронная плотность в невозмущенном атоме, $x = r/R$, а значение $R = (18/Z)^{1/3}$ остается неизменным. Вычисление дипольного момента ³²⁾

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &= - \int \mathbf{r} n(\mathbf{r}) dV \approx \frac{3R}{2Z} \int \mathbf{r} (r\mathcal{E}) \frac{rn_0(r)}{R-r} dV = \\ &= \left\{ \frac{R}{2Z} \int \frac{r^3 n_0(r)}{R-r} dV \right\} \mathcal{E} = \frac{63}{16Z} \mathcal{E} \end{aligned}$$

дает значение поляризуемости в рассматриваемой модели

$$\beta_{т.-ф} = \frac{63}{16Z}. \quad (2)$$

³²⁾ Сравнить, например, с вычислением интеграла I в 7.22.

Аналогичная (1) оценка для внешних (валентных) электронов, находящихся на периферии атома ($r \sim a_B$), где характерная величина поля $\mathcal{E}_{ат} \sim e/a_B^2 \ll \mathcal{E}_{т.-ф}$, дает $\beta_{вал} \sim a_B^3 = 1$ а. е., так что поляризуемость атома определяется валентными электронами. Отметим, однако, что типичные значения поляризуемостей атомов обычно велики и составляют $\sim 10 \div 100$ а. е., см. в связи с этим 11.38.

11.40. Стационарные состояния молекулы в отсутствие электрического поля описываются волновыми функциями (сравнить с 11.27, $\Lambda = S = 0$)

$$\Psi_{nvKM}^{(0)} = \Psi_{эл, n}(\mathbf{R}; \xi_1, \xi_2, \dots) \Psi_{кол, v}(R) \Psi_{вр, KM}(\theta, \varphi) \quad (1)$$

(ξ_a — координаты и спиновые переменные электронов), а их энергия

$$E_{nvK}^{(0)} = E_n^{(0)} + \hbar\omega_{кол}(v + 1/2) + B_e K(K + 1).$$

Матричные элементы возмущения $\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}}\mathcal{E}$ удобно вычислять в два приема: сначала проинтегрировать по координатам электронов и относительному расстоянию R между ядрами при фиксированной ориентации оси молекулы, а затем уже выполнить интегрирование по углам θ, φ , определяющим направление этой оси. В случае диагональных по квантовым числам n, v матричных элементов первое интегрирование дает

$$\int (\Psi_{эл, n} \Psi_{кол, v})^* \hat{\mathbf{d}} \Psi_{эл, n} \Psi_{кол, v} d\tau = \mathbf{d} = d\mathbf{n}_0, \quad \mathbf{n}_0 = \mathbf{R}/R \quad (2)$$

(направление вектора \mathbf{d} вдоль оси молекулы очевидно из соображений симметрии). Направив теперь ось z вдоль электрического поля \mathcal{E} и учтя, что вращательная в. ф. $\Psi_{вр, KM}$ (при $\Lambda = 0$) является шаровой функцией $Y_{KM}(\theta, \varphi)$, находим, что матричные элементы возмущения между в. ф. (1), относящимися к данному уровню молекулы (т. е. отличающимися лишь значениями M), равны нулю, так как $\int \cos \theta Y_{KM}^* Y_{KM} d\Omega = 0$. Соответственно в первом порядке теории возмущений уровни молекулы не смещаются. Так как в случае однородного поля проекция момента на направление вектора \mathcal{E} является «хорошим» квантовым числом, то в. ф. (1) являются правильными функциями нулевого приближения и можно использовать теорию возмущений для невырожденных уровней. При этом поправка второго порядка

$$E_{nvKM}^{(2)} = \sum_{k'}' \frac{|\langle k' | \hat{\mathbf{d}}\mathcal{E} | k \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}}, \quad (3)$$

где для краткости записи использован один индекс k для описания различных состояний молекулы.

Теперь заметим, что в сумме (3) можно ограничиться лишь такими состояниями $|k'\rangle$, которые отвечают исходному электронному терму и отличаются только вращательным квантовым числом K . При этом в формуле (3)

$$E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)} = B_e [K(K+1) - K'(K'+1)],$$

а вклад состояний с другими квантовыми числами существенно меньше из-за гораздо большей величины энергетических знаменателей, так как $E_{\text{вр}} \ll E_{\text{кол}} \ll E_{\text{эл}}$. Учитывая это обстоятельство и соотношение (2), выражение (3) можно записать в виде

$$\begin{aligned} E_{nvKM}^{(2)} &= \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{B_e} \sum_{K'} \frac{|\langle K'M | \cos \theta | KM \rangle|^2}{K(K+1) - K'(K'+1)} = \\ &= \frac{d^2 \mathcal{E}^2 [K(K+1) - 3M^2]}{2B_e K(K+1)(2K-1)(2K+3)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь использован результат задачи 8.11. Так как волновая функция состояния $|KM\rangle$ является шаровой функцией, то сумма (4) аналогична вычисленной в 8.11 и получается из нее с помощью замен $l \rightarrow K$, $m \rightarrow M$, $\hbar^2/2I \rightarrow B_e$. В частности, для $K=0$ имеем $E_{nv}^{(2)} = -d^2 \mathcal{E}^2/6B_e$.

Заметим в заключение, что для двухатомных молекул с одинаковыми ядрами дипольный момент (2) обращается в нуль и влияние электрического поля на уровни таких молекул требует специального рассмотрения.

11.41. В линейном по магнитному полю приближении возмущение гамильтониана атома водорода имеет вид

$$\hat{V} = \mu_B \mathcal{H} (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z),$$

где μ_B — магнетон Бора, а ось z направлена вдоль вектора \mathcal{H} . Так как операторы \hat{l}_z и \hat{s}_z коммутируют друг с другом и с гамильтонианом, то с. ф. невозмущенного гамильтониана $\Psi_{nlm} \chi_{s_z}$ (см. (IV.3), χ_{s_z} — спиновая часть в. ф.) являются правильными функциями нулевого приближения и поправка первого порядка к уровням энергии равна

$$E_{nl_z s_z}^{(1)} = \langle nll_z s_z | \hat{V} | nll_z s_z \rangle = \mu_B \mathcal{H} (l_z + 2s_z). \quad (1)$$

Как видно, $2n^2$ -кратно вырожденный уровень расщепляется на $2n+1$ компоненты (напомним, что $l_z = 0, \pm 1, \dots, \pm(n-1)$, а $s_z = \pm 1/2$), крайние из которых невырожденные.

Условия применимости результата (1) предполагают, что расщепление уровня $\Delta E_{\text{Зеем}} = 2\mu_B \mathcal{H}$ много больше интервала его тонкой структуры ΔE_{FS} , см. 11.1, но много меньше расстояния ΔE_n между соседними уровнями атома водорода. Для $n = 2$ условие $\Delta E_{\text{FS}} \ll \Delta E_{\text{Зеем}} \ll \Delta E_n$ принимает вид

$$5 \cdot 10^{-5} \text{ эВ} \ll 4\mu_B \mathcal{H} \ll 2 \text{ эВ}, \text{ или } 3 \cdot 10^3 \text{ Э} \ll \mathcal{H} \ll 10^8 \text{ Э}$$

(напомним, что $e/a_B^2 = 5,14 \cdot 10^9 \text{ В/см} = 1,71 \cdot 10^7 \text{ Э}$).

11.42. Обозначим $\Delta_{0(1)}$ сдвиги основного уровня атома водорода за счет взаимодействия спиновых магнитных моментов электрона и протона для состояний с их суммарным спином $S = 0(1)$. Они определяются формулой (3) из 11.2, причем $\Delta = \Delta_1 - \Delta_0 = 1420 \text{ МГц}$. В отсутствие магнитного поля в. ф. соответствующих невозмущенных состояний имеют вид $\Psi_0(r) \chi_{SS_z}$, где χ_{SS_z} — спиновая функция системы, а $\Psi_0(r)$ — в. ф. основного состояния атома водорода; уровень с $S = 0$ — невырожденный, а с $S = 1$ — трехкратно вырожден. Для расчета смещения (и расщепления) рассматриваемых близких уровней под влиянием возмущения³³⁾ $\hat{V} = \mu_B (\hat{I}_z + 2\hat{s}_{e,z}) \mathcal{H}$ найдем его матричные элементы. Используя следующую нумерацию состояний: 1 — для $S = 0, S_z = 0$; 2 — для 1,0; 3 — для 1, +1 и 4 — для 1, -1 а также явный вид спиновых функций³⁴⁾ χ_{SS_z} (см. 5.10), находим, что отличны от нуля лишь четыре матричных элемента

$$\langle 1 | \hat{V} | 2 \rangle = \langle 2 | \hat{V} | 1 \rangle = \langle 3 | \hat{V} | 3 \rangle = -\langle 4 | \hat{V} | 4 \rangle = \mu_B \mathcal{H}.$$

Включая в матрицу возмущения также и невозмущенные сверхтонкие сдвиги $\Delta_{0,1}$, как обычно приходим к секулярному уравнению

$$\begin{vmatrix} \Delta_0 - E^{(1)} & \mu_B \mathcal{H} & 0 & 0 \\ \mu_B \mathcal{H} & \Delta_1 - E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_1 + \mu_B \mathcal{H} - E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_1 - \mu_B \mathcal{H} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad (1)$$

³³⁾ Мы ограничились линейной по полю \mathcal{H} его частью, при этом взаимодействием магнитного момента протона, ввиду его малости ($\mu_p/\mu_e \sim m_e/m_p \sim 10^{-3}$), с магнитным полем пренебрежено.

³⁴⁾ В частности,

$$\chi_{1(0),0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p \pm \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\},$$

при этом $\hat{\sigma}_{e,z} \chi_{1(0),0} = \chi_{0(1),0}$.

из которого легко находим

$$E_{1,2}^{(1)} = \frac{1}{2} [(\Delta_0 + \Delta_1) \mp \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_0)^2 + 4\mu_B^2 \mathcal{H}^2}], \quad (2)$$

$$E_{3,4}^{(1)} = \Delta_1 \pm \mu_B \mathcal{H}.$$

Отсюда видно, что для состояний с $S = 1$ компоненты уровня с $S_z = \pm 1$ испытывают линейный по \mathcal{H} сдвиг. Для состояний с $S_z = 0$ синглетного и триплетного невозмущенных уровней, «перемешиваемых» магнитным полем, сдвиги уровней в слабом поле, $\mu_B \mathcal{H} \ll \Delta$ (отметим, что $\mathcal{H}_0 = \Delta/\mu_B \approx 10^3$ Э), квадратичны по полю:

$$E_{1(2)}^{(1)} \approx \Delta_{0(1)} \mp \frac{\mu_B^2 \mathcal{H}^2}{\Delta_1 - \Delta_0} \quad (3)$$

(из-за малости сверхтонкого расщепления $\Delta_1 - \Delta_0$ эта часть сдвига существенно больше, чем от пренебреженных в возмущении членов $\propto \mathcal{H}^2$).

В сильном же поле, когда $\Delta \ll \mu_B \mathcal{H}$, имеем

$$E_{1,2}^{(1)} \approx \mp \mu_B \mathcal{H}, \quad \chi_{1(2)} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{0,0} \mp \chi_{1,0}), \quad (4)$$

при этом в возникающих состояниях проекции электронного и протонного спинов на направление магнитного поля имеют определенные значения (а нарушающее их сохранение взаимодействие спиновых магнитных моментов выступает как возмущение).

11.43. Решение задачи аналогично предыдущей. Теперь взаимодействие системы с магнитным полем имеет вид³⁵⁾

$$\hat{V} = 2\mu_B (\hat{s}_{ez} - \hat{s}_{pz}) \mathcal{H}.$$

Используя такую же нумерацию состояний, как и в предыдущей задаче, с заменой спина протона на спин позитрона, замечаем, что отличны от нуля лишь два матричных элемента возмущения: $\langle 1 | \hat{V} | 2 \rangle = \langle 2 | \hat{V} | 1 \rangle = 2\mu_B \mathcal{H}$, а секулярное уравнение принимает вид

$$\begin{vmatrix} \Delta_0 - E^{(1)} & 2\mu_B \mathcal{H} & 0 & 0 \\ 2\mu_B \mathcal{H} & \Delta_1 - E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_1 - E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_1 - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

³⁵⁾ Орбитальный магнитный момент позитрония равен нулю, так как вклады в него электрона и позитрона компенсируют друг друга.

($\Delta_{0(1)}$ — сдвиги уровней пара-(орто-)позитрония, определяющие его тонкую структуру). Его решение дает сдвиги уровней

$$E_{1,2}^{(1)} = \frac{1}{2} [(\Delta_0 + \Delta_1) \mp \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_0)^2 + 16\mu_B^2 \mathcal{H}^2}], \quad E_{3,4}^{(1)} = \Delta_1.$$

Таким образом, компоненты уровня ортопозитрония с $S_z = \pm 1$ в рассматриваемом приближении вообще не испытывают сдвига в магнитном поле. Сдвиг же компонент с $S_z = 0$, как и в предыдущей задаче, в слабом поле, $\mu_B \mathcal{H} \ll \Delta$, квадратичен по \mathcal{H} и описывается формулой (3) из нее, если во второе слагаемое ввести множитель, равный 4. В случае сильного поля, $\Delta_{0(1)} \ll \ll \mu_B \mathcal{H}$, сдвиги уже линейны: $E_{1,2}^{(1)} \approx \mp 2\mu_B \mathcal{H}$.

Правильные спиновые функции нулевого приближения для состояний с $S_z = 0$, «перемешиваемых» магнитным полем, определяются по известному общему правилу и имеют вид

$$\chi_{1(2)} = C_{1(2)}^{(1)} \chi_{0,0} + C_{1(2)}^{(2)} \chi_{1,0}, \quad C_{1(2)}^{(1)} = \frac{2\mu_B \mathcal{H}}{E_{1(2)}^{(1)} - \Delta_0} C_{1(2)}^{(2)}.$$

В частности, в случае сильного поля имеем $C_{1(2)}^{(1)} \approx \mp C_{1(2)}^{(2)}$, так что

$$\chi_1 \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_s \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p, \quad \chi_2 \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_s \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p,$$

т. е. проекции спинов частиц на направление поля \mathcal{H} уже имеют определенные значения — естественный физический результат. В случае же слабого поля «перемешивание» состояний мало (однако это обстоятельство, тем не менее, существенно сказывается на времени жизни позитрония, см. в связи с этим 11.61).

11.44. Рассматриваемый сдвиг уровня равен $\Delta E = -\frac{1}{2} \chi \mathcal{H}^2$, где χ определяется известной формулой для диамагнитной восприимчивости³⁶⁾

$$\chi = -\frac{e^2}{6mc^2} \bar{r}^2, \quad \bar{r}^2 = 3a_B^2; \quad \chi = -\frac{1}{2} \alpha^2 a_B^3 \quad (1)$$

(среднее значение \bar{r}^2 вычисляется для основного состояния атома водорода). Этот сдвиг одинаков для всех спиновых состояний электрона. Зависящая от спинового состояния электрона (и

³⁶⁾ Здесь $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры. Подчеркнем, что малость $\sim \alpha^2$ в величине χ отражает релятивистский характер взаимодействия с магнитным полем, сравнить со значениями $\beta \sim \alpha_B^3$ поляризуемостей атомных систем в электрическом поле.

доминирующая!) часть сдвига уровня рассмотрена в 11.41, см. также 11.42.

11.45. Согласно известной формуле для диамагнитной восприимчивости получаем

$$\chi_{\text{ат}} = -\frac{e^2}{6mc^2} \sum_{a=1,2} \overline{r_a^2} = -\frac{e^2}{mc^2} Z_{\text{эф}}^{-2} \equiv -\alpha^2 Z_{\text{эф}}^{-2} a_{\text{В}}^3. \quad (1)$$

Здесь средние значения $\overline{r_a^2}$ вычисляются с волновой функцией из 11.6, причем $Z_{\text{эф}} = 27/16$. Численное значение восприимчивости согласно (1) составляет $\chi_{\text{ат}} = -2,77 \cdot 10^{-30}$ см³ (см. подстрочное примечание в предыдущей задаче). При нормальных условиях можно считать все атомы газа находящимися в основном состоянии, так что для магнитной восприимчивости 1 см³ газа гелия получаем

$$\chi_{\text{He}} = n_0 \chi_{\text{ат}} = -7,5 \cdot 10^{-11},$$

здесь $n_0 = 2,69 \cdot 10^{19}$ см⁻³ — число Лоренца.

11.46. Рассматриваемое состояние имеет момент $l = 0$, а его невозмущенная в. ф. $\Psi_0 = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa r} / \sqrt{2\pi} r$, см. 4.10. Диамагнитный сдвиг уровня равен

$$\Delta E_0 = \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{12mc^2} \int r^2 \Psi_0^2 dV = \frac{e^2}{24mc^2 \kappa^2} \mathcal{H}^2, \quad (1)$$

так что магнитная восприимчивость

$$\chi_0 = -\frac{e^2}{12mc^2 \kappa^2}. \quad (2)$$

Условие применимости полученного результата: $\Delta E_0 \ll |E_0^{(0)}| = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$.

Полученные формулы справедливы и для состояний частицы с малой энергией связи и орбитальным моментом $l = 0$ в достаточно произвольном короткодействующем потенциале (отрицательный атомный ион) $U_s(r)$ радиуса r_s , когда область локализации частицы, она $\sim \kappa^{-1}$, много больше r_s . При этом доминирующая роль больших расстояний проявляется в расходящемся при $\kappa \rightarrow 0$ характере зависимости ΔE_0 и χ_0 от энергии связи частицы. Поправка на конечность ($r_s \neq 0$) радиуса потенциала определяется введением в полученные выражения множителя $C_{\kappa 0}^2$, где $C_{\kappa 0}$ — асимптотический коэффициент, сравнить с 11.36. При этом, в частности, магнитная восприимчивость

$$\chi_0 = -\frac{e^2 C_{\kappa 0}^2}{12mc^2 \kappa^2}. \quad (3)$$

11.47. Ввиду того, что в. ф. состояния частицы с малой энергией связи убывает на больших расстояниях достаточно медленно, а возмущение (его квадратичная по полю часть)

$$\hat{V} = -\frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} \hat{l} + \frac{e^2}{8mc^2} [r\mathcal{H}]^2 \quad (1)$$

при этом возрастает, доминирующую роль в интеграле матричного элемента $\langle 1l_z | [\mathcal{H}r]^2 | 1l_z \rangle$, определяющего $\propto \mathcal{H}^2$ диамагнитную часть сдвига уровня, играют большие расстояния³⁷⁾. Вне области действия потенциала U_S в. ф. невозмущенного состояния имеет вид, указанный в 11.37. При вычислении матричного элемента возмущения этим выражением для в. ф. можно воспользоваться уже при всех значениях r (вклад области $r \leq r_S$ несуществен). Теперь, имея в виду значение интеграла

$$\int_0^\infty x^3 K_{3/2}^2(x) dx = \frac{5\pi}{8}$$

(см. [33, с. 707]), легко находим энергетические сдвиги (ось z направлена вдоль магнитного поля):

$$\begin{aligned} \Delta E_{l=1, l_z=0} &= \\ &= \frac{e^2 \kappa^2 C_{\kappa 1}^2 \mathcal{H}^2}{2\pi mc^2} \langle 10 | \sin^2 \theta | 10 \rangle \int_0^\infty r^3 K_{3/2}^2(\kappa r) dr = \frac{e^2 C_{\kappa 1}^2}{8mc^3 \kappa^2} \mathcal{H}^2, \\ \Delta E_{l=1, l_z=\pm 1} &= \mp \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} + \frac{e^2 C_{\kappa 1}^2}{4mc^2 \kappa^2} \mathcal{H}^2. \end{aligned} \quad (2)$$

Подчеркнем, что линейный по полю член возмущения (1) приводит только к линейному же по \mathcal{H} парамагнитному сдвигу уровня (высшие поправки по нему равны нулю). Напомним также, что $C_{\kappa 1}^2 \propto \kappa$ при $\kappa \rightarrow 0$, см. 11.37, так что $\Delta E^{(2)} \propto \kappa^{-1}$.

³⁷⁾ Это проявляется в расходимости восприимчивости при $\kappa \rightarrow 0$. Отметим, что при значениях момента $l \geq 2$ роль больших расстояний уже не выделена. Диамагнитная восприимчивость определяется видом волновой функции на расстояниях $\sim r_S$ и ее величина

$$\chi_{\text{диа}} \sim e^2 r_S^2 / mc^2$$

зависит от конкретного вида потенциала U_S . Сравнить со свойствами поляризуемости слабосвязанных состояний, рассмотренными в 11.36 и 11.37.

11.48. Возмущение гамильтониана молекулы при наложении однородного магнитного поля имеет вид

$$\hat{V} = \mu_B (\hat{L} + 2\hat{S}) \mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a \{r_a^2 \mathcal{H}^2 - (r_a \mathcal{H})^2\}. \quad (1)$$

Здесь суммирование ведется по всем электронам молекулы, L и S — их суммарные орбитальный и спиновый моменты, а ядерным магнетизмом ввиду его малости $\sim m_e/M_{яд}$ пренебрежено.

Используя выражение для с. ф. $\Psi_{nvKM}^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана молекулы, приведенное в 11.40, и указанный там способ вычисления матричных элементов, замечаем, что в первом порядке по \mathcal{H} сдвиг уровней молекулы отсутствует, так как $L = S = 0$ и

$$\int (\Psi_n^{эл} \Psi_v^{кол})^* \hat{L} (\Psi_n^{эл} \Psi_v^{кол}) \equiv \Lambda n_0 = \Lambda p_0 = 0.$$

Сдвиг уровня за счет второго слагаемого в выражении (1) равен

$$E_{KM}^{(2)} = \frac{e^2 \mathcal{H}_i \mathcal{H}_k}{8mc^2} \int \Psi_{nvKM}^{(0)*} \sum_a \{r_a^2 \delta_{ik} - x_{ai} x_{ak}\} \Psi_{nvKM}^{(0)} d\tau'. \quad (2)$$

Проинтегрировав по координатам электронов и переменной R , получаем

$$E_{KM}^{(2)} = \frac{e^2}{8mc^2} \mathcal{H}_i \mathcal{H}_k \int Y_{KM}^* \{a \delta_{ik} - b n_{0i} n_{0k}\} Y_{KM} d\Omega_{n_0}, \quad (3)$$

где a, b — некоторые постоянные, не зависящие от квантовых чисел K и M . Воспользовавшись соотношением

$$\int Y_{KM}^* n_{03} n_{03} Y_{KM} d\Omega_{n_0} \equiv \int \cos^2 \theta |Y_{KM}|^2 d\Omega = \frac{2K^2 + 2K - 1 - 2M^2}{(2K - 1)(2K + 3)}$$

(см. 8.11), согласно формулам (2) и (3) находим

$$E_{KM}^{(2)} = \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8mc^2} \left\{ a - b \frac{2K^2 + 2K - 1 - 2M^2}{(2K - 1)(2K + 3)} \right\}. \quad (4)$$

Теперь заметим, что вклад второго приближения теории возмущений для слагаемого $\hat{V}' = \mu_B \hat{L} \mathcal{H}$ в выражении (1) имеет такую же зависимость от K и M , как и в формуле (4). Это связано с тем, что вся зависимость от K, M в соответствующей сумме (VIII. 1) определяется, по существу, лишь матричным элементом возмущения, а в энергетических знаменателях ею можно пренебречь ввиду малости вращательной энергии. Поэтому после выполнения суммирования по всем промежуточным состояниям в

формуле теории возмущений второго приближения она принимает вид, аналогичный выражению (2).

Таким образом, формула (4) определяет искомое зеемановское расщепление вращательных уровней двухатомной молекулы с электронным термом $^1\Sigma$, возникающее во втором порядке по магнитному полю. Заметим, что вклад в сдвиг уровня $E_{KM}^{(2)}$ непосредственно от квадратичного по \mathcal{H} слагаемого в (1) положителен. Он, как и в случае атомов с $L = S = 0$, соответствует диамагнетизму молекул. Вклад же второго приближения от линейного по \mathcal{H} слагаемого в (1) (отсутствующий в случае атомов с $L = S = 0$) может иметь оба знака. В частности, если рассматриваемый молекулярный терм является основным, эта часть сдвига отрицательна.

В заключение заметим, что для молекул с термами, отличными от $^1\Sigma$, сдвиги уровней в слабом магнитном поле линейны по \mathcal{H} , см. задачи к § 113 из [1].

11.49. Оператор взаимодействия частицы с атомом (обычное электростатическое взаимодействие системы зарядов) с учетом малости по сравнению с расстоянием между ними размера атома имеет вид (Ze — заряд частицы, атом — в начале координат)

$$\hat{U} = Ze\varphi_{\text{ат}}(\mathbf{R}) = Ze \left\{ \frac{d\mathbf{R}}{R^3} + \varphi_{\text{ат.квдр}}(\mathbf{R}) + \dots \right\}. \quad (1)$$

Потенциал же взаимодействия $U(R)$ частицы и атома при их медленном относительном движении, когда возбуждением атома можно пренебречь, в соответствии с основной идеей адиабатического приближения (см. задачи § 6 главы 8, особенно 8.58) определяется изменением энергии атома под влиянием взаимодействия (1) и получается усреднением этого оператора, рассматриваемого как возмущение, по состоянию атома, т. е. $U(R) = \bar{\bar{U}}$.

В первом порядке теории возмущений $\bar{\bar{U}} = 0$, так как все мультипольные моменты атома обращаются в нуль ввиду сферической симметрии (для состояний с $L = 0$). Во втором порядке, ограничиваясь в (1) первым, наиболее медленно убывающим с ростом R дипольным слагаемым, получаем искомый потенциал взаимодействия:

$$U(R) = -\frac{\beta_0}{2} \left(\frac{Ze}{R^2} \right)^2 = -\frac{9Z^2e^2a_B^3}{4R^4}. \quad (2)$$

Здесь учтено, что возмущение $\hat{V} = Ze d\mathbf{R}/R^3$ эквивалентно взаимодействию атома с однородным электрическим полем $\mathcal{E} = -ZeR/R^3$, и использовано значение $\beta_0 = 9a_B^3/2$ для поляризуемости основного состояния атома водорода. Подчеркнем,

что взаимодействие (2) (его называют *поляризационным*) имеет характер притяжения и убывает $\propto R^{-4}$ с ростом R .

11.50. Как и в предыдущей задаче, взаимодействие определяется дипольным слагаемым $\hat{V} = Ze(\mathbf{dR})/R^3$ (при этом существенно, что молекула находится в состоянии с вращательным числом $K = 0$, так как в противном случае доминирующим будет квадрупольное взаимодействие, отличное от нуля уже в первом порядке теории возмущений и убывающее с ростом R как R^{-3}). Соответственно

$$U(R) = -\frac{1}{2} \beta_0 \left(\frac{Ze}{R^2} \right)^2 = -\frac{Z^2 e^2 d^2}{6B_e R^4}, \quad (1)$$

здесь в поляризационном потенциале использовано значение поляризуемости молекулы из 11.40 (при $K = 0$).

11.51. Вообще говоря, $U(R) \propto R^{-2}$, что соответствует взаимодействию заряда с дипольным моментом, наличие которого у невозмущенного атома водорода в возбужденном состоянии связано со специфическим для кулоновского потенциала случайным вырождением уровней с различными значениями l и различной четностью. Коэффициент пропорциональности в указанном законе зависит от состояния атома, причем соответствующие независимые состояния³⁸⁾, диагонализующие возмущение — точно такие же, как для атома в однородном электрическом поле, и для уровня с $n = 2$ рассмотрены в 11.33.

В заключение отметим, что среднее значение $\bar{U}(R)$ по всем независимым состояниям атома водорода с данным n обращается в нуль. Также равно нулю и среднее значение следующего, $\propto R^{-3}$, члена в потенциале, соответствующего взаимодействию частицы с квадрупольным моментом атома. Значение $\bar{U}(R) \propto R^{-4}$ носит рассмотренный в двух предыдущих задачах поляризационный характер.

11.52. Потенциал взаимодействия атомов $U(R)$ определяется электронным термом $E(R)$, см. [1, § 89]. Для атомов, находящихся в основных состояниях, терм $E_0(R)$ можно рассчитать вариационным методом. В рассматриваемой задаче гамильтониан электронной подсистемы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_{01} + \hat{H}_{02} + \hat{U} \approx \hat{H}_{01} + \hat{H}_{02} - \frac{e^2(2z_1 z_2 - x_1 x_2 - y_1 y_2)}{R^3},$$

³⁸⁾ Для них проекция орбитального момента на направление \mathbf{R} имеет определенное значение. При этом вектор $\bar{\mathbf{d}}$ направлен вдоль \mathbf{R} , причем $\bar{\mathbf{d}} = 0$ в состояниях с $l_z = \pm(n-1)$. Следует, однако, иметь в виду, что при движении частиц между рассматриваемыми состояниями возникают переходы, сравните с 11.55.

где $\hat{H}_{01(2)}$ — гамильтонианы изолированных атомов водорода, а их взаимодействие учитывается в диполь-дипольном приближении, сравнить с 11.49.

Среднее значение энергии системы $\bar{E}(\alpha, R)$ в состоянии с волновой функцией $\Psi_{\text{проб}}$ легко найти, если учесть значения следующих интегралов:

1) $\langle 0 | x | 0 \rangle \equiv \int x \Psi_0^2(r) dV = 0$ ввиду нечетности по x подынтегральной функции; аналогично равны нулю все интегралы, в которых какая-либо из компонент векторов \mathbf{r}_1 или \mathbf{r}_2 входит в нечетной степени;

2) $\langle 0 | \hat{H}_0 | 0 \rangle = -e^2/2a_B$, так как Ψ_0 является собственной функцией оператора \hat{H}_0 ;

$$3) \langle 0 | x^2 | 0 \rangle = \langle 0 | y^2 | 0 \rangle = \langle 0 | z^2 | 0 \rangle = \frac{1}{3} \langle 0 | r^2 | 0 \rangle = a_B^2;$$

4) $\langle 0 | x \hat{H}_0 x | 0 \rangle = \langle 0 | y \hat{H}_0 y | 0 \rangle = \langle 0 | z \hat{H}_0 z | 0 \rangle = \int (z \Psi_0) \hat{H}_0 (z \Psi_0) \times \times dV = 0$, наиболее простой способ вычисления таких матричных элементов указан в начале решения задачи 11.31.

В результате получаем (при этом $C^2 \approx 1 - 6\alpha^2 a_B^4$ из условия нормировки на единицу пробной в. ф.)

$$\bar{E}(\alpha, R) \approx -\frac{e^2}{a_B} + 6\alpha^2 e^2 a_B^3 + 12\alpha e^2 a_B^4 \frac{1}{R^3}$$

и после минимизации по параметру α находим приближенное вариационное значение энергии основного состояния рассматриваемой системы из двух атомов водорода $E_0(R)$ и энергии их взаимодействия $U(R)$:

$$E_0(R) = -\frac{e^2}{a_B} + U(R), \quad U(R) = -6 \frac{e^2 a_B^5}{R^6}, \quad (1)$$

здесь слагаемое $-e^2/a_B$ соответствует энергии двух изолированных атомов.

Полученный закон изменения с расстоянием энергии взаимодействия атомов $U \propto R^{-6}$ соответствует силам Ван-дер-Ваальса. Отметим, что точный численный расчет приводит к значению коэффициента, равному 6,5 (вместо 6 в формуле (1)).

11.53. Взаимодействие молекул возникает во втором порядке теории возмущений по диполь-дипольному взаимодействию (сравнить с предыдущей задачей)

$$\hat{V} = \frac{(\hat{\mathbf{d}}_1 \hat{\mathbf{d}}_2) R^2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \mathbf{R})(\hat{\mathbf{d}}_2 \mathbf{R})}{R^5}$$

и определяется выражением

$$U(R) = E_0^{(2)}(R) = \sum_{k_1 k_2}' \frac{|\langle k_1 k_2 | \hat{\mathbf{d}}_1 \hat{\mathbf{d}}_2 R^2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \mathbf{R})(\hat{\mathbf{d}}_2 \mathbf{R}) | 0, 0 \rangle|^2}{(E_{0,1} + E_{0,2} - E_{k_1} - E_{k_2}) R^{10}}, \quad (1)$$

где $k_{1,2}$ — наборы квантовых чисел, характеризующие стационарные состояния изолированных молекул, см. 11.40. При этом существенно, что вращательные квантовые числа молекул $K_1 = K_2 = 0$, так как в противном случае взаимодействие возникает в первом порядке по квадруполь-квадрупольному взаимодействию и убывает с расстоянием как R^{-3} .

Теперь заметим, что доминирующую роль в сумме (1) играют слагаемые, отвечающие таким состояниям, все квантовые числа которых, за исключением K и M , такие же, как и у сталкивающихся молекул, так как при этом аномально малы энергетические знаменатели (ввиду малости вращательной энергии, сравнить с 11.40). Направив ось z вдоль вектора \mathbf{R} и выполнив в матричных элементах интегрирование по координатам электронов и относительному расстоянию между ядрами для каждой из молекул, запишем сумму (1) в виде

$$U(R) = - \sum_{K_1 M_1 K_2 M_2} \frac{d_1^2 d_2^2 |\langle K_1 M_1, K_2 M_2 | 3n_{1z} n_{2z} - \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2 | 0, 0 \rangle|^2}{[B_1 K_1 (K_1 + 1) + B_2 K_2 (K_2 + 1)] R^6}, \quad (2)$$

здесь $\mathbf{n}_{1,2}$ — единичные векторы, определяющие ориентации осей молекул, волновые функции состояний $|KM\rangle$ — соответствующие шаровые функции. Учитывая их вид (III.7), находим, что матричные элементы $\langle KM | n_i | 00 \rangle$ отличны от нуля лишь при $K = 1$ и равны при этом

$$\langle 11 | n_x | 00 \rangle = \langle 11 | \sin \theta \cos \varphi | 00 \rangle = -\langle 1, -1 | n_x | 00 \rangle = \frac{i}{\sqrt{6}},$$

$$\langle 11 | n_y | 00 \rangle = \langle 1, -1 | n_y | 00 \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad \langle 10 | n_z | 00 \rangle = -\frac{i}{\sqrt{3}}.$$

Окончательное выражение для энергии взаимодействия молекул принимает вид

$$U(R) = - \frac{d_1^2 d_2^2}{3(B_1 + B_2) R^6} \quad (3)$$

(ван-дер-ваальсовское притяжение).

11.54. Рассматриваем электрон в совместном поле двух одинаковых атомов как находящийся в поле двух потенциалов нулевого радиуса. Электронные термы такой модели были

определены в 11.28, откуда следует, что обменный потенциал на больших расстояниях равен

$$\Delta(R) = E_g(R) - E_u(R) = -\frac{2\hbar^2\alpha}{mR} e^{-\alpha R}. \quad (1)$$

Записав теперь потенциал взаимодействия для четного и нечетного термов в виде $U_{g,u}(R) = U_0(R) \pm \frac{1}{2} \Delta(R)$, находим для общей их части выражение

$$U_0(R) \approx \frac{\hbar^2\alpha}{mR} e^{-2\alpha R} - \frac{\hbar^2}{2mR^2} e^{-2\alpha R} - \frac{\beta_0 e^2}{2R^4}, \quad (2)$$

в котором также учтен согласно 11.49 поляризационный потенциал, при этом β_0 — поляризуемость атома (этот достаточно медленно убывающий с расстоянием потенциал при более последовательном рассмотрении должен учитываться в потенциале взаимодействия электрона с атомом, приводящем к образованию иона). Заметим также, что для вывода взаимодействия (2) из формулы (3) задачи 11.28 последовательными итерациями, ее следует переписать в виде ($\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$)

$$\kappa_{g,u} - \alpha = \pm \frac{1}{R} \exp(-\kappa_{g,u}R) \approx \pm \frac{1}{R} e^{-\alpha R} - \frac{1}{R} e^{-2\alpha R}.$$

Здесь для $\kappa_{g,u}$ в показателе экспоненты использовано его значение первого приближения, $\kappa_{g,u} \approx \alpha \pm e^{-\alpha R}/R$, и выполнено соответствующее разложение экспоненциального сомножителя.

11.55. Потенциалы взаимодействия (для различных состояний) получаются в результате диагонализации оператора дипольного взаимодействия атомов

$$\hat{V} = \frac{(\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2) R^2 - 3(\mathbf{d}_1 \mathbf{R})(\mathbf{d}_2 \mathbf{R})}{R^5}, \quad \mathbf{d}_{1,2} = -\mathbf{r}_{1,2},$$

где $\mathbf{r}_{1,2}$ — радиусы-векторы электронов в атомах водорода относительно своих ядер, сравнить с 11.49. Такая диагонализация проводится на базе из собственных функций оператора Гамильтона $\hat{H}_0 = \hat{H}_{01} + \hat{H}_{02}$ для двух невзаимодействующих друг с другом атомов водорода, отвечающих вырожденному невозмущенному уровню

$$E^{(0)} = -\frac{1}{2n_1^2} - \frac{1}{2n_2^2} = -\frac{5}{8}$$

(одно из n равно 1, а другое 2). В условиях задачи для вырожденных состояний отличны от нуля как матричные элементы операторов $\mathbf{d}_{1,2}$, так и возмущения \hat{V} .

С учетом того, что:

1) матричные элементы $d_{1,2}$ отличны от нуля лишь для состояний с различной четностью,

2) проекция момента на направление \mathbf{R} является интегралом движения, а также

3) симметрии задачи относительно обоих одинаковых атомов, — вид комбинаций невозмущенных собственных функций, диагонализующих оператор возмущения \hat{V} , т. е. являющихся правильными функциями нулевого приближения, представляется очевидным:

$$\begin{aligned}\Psi_{1,2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1s; 2s\rangle \pm |2s; 1s\rangle); \\ \Psi_{3,4} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1s; 2p0\rangle \pm |2p0; 1s\rangle); \\ \Psi_{5,6} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1s; 2p1\rangle \pm |2p1; 1s\rangle); \\ \Psi_{7,8} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1s; 2p, -1\rangle \pm |2p, -1; 1s\rangle).\end{aligned}\tag{1}$$

Здесь первые символы $1s, 2s, 2pm$ в векторах состояний $|\dots\rangle$ характеризуют состояние электрона в первом атоме, вторые — во втором (каждый из атомов с вероятностью $1/2$ находится как в основном, $1s$ -состоянии, так и в возбужденном состоянии с $n = 2$, ось z направлена вдоль вектора \mathbf{R}).

Воспользовавшись известными выражениями для «водородных» в. ф. $\Psi_{nlm} = R_{nl}Y_{lm}$, см. (IV.3) и (III.7), находим значения отличных от нуля матричных элементов $\langle 2lm | \mathbf{r} | 1s \rangle$:

$$\langle 2p0 | z | 1s \rangle = -\frac{i}{\sqrt{3}} d_0, \quad d_0 = \frac{256}{81\sqrt{6}},\tag{2}$$

$$\langle 2p1 | x + iy | 1s \rangle = -\langle 2p, -1 | x - iy | 1s \rangle = i \sqrt{\frac{2}{3}} d_0.$$

Теперь, записав

$$\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 = \frac{1}{2} (x_1 + iy_1)(x_2 - iy_2) + \frac{1}{2} (x_1 - iy_1)(x_2 + iy_2) + z_1 z_2,$$

нетрудно найти потенциалы диполь-дипольного взаимодействия $U_a(R) = \langle a | \hat{V} | a \rangle$ в указанных выше (1) состояниях, $a = 1 \div 8$. Они имеют вид

$$\begin{aligned}U_a(R) &= g_a \frac{d_0^2}{R^3}, \quad \text{где } g_{1,2} = 0, \quad g_{3,4} = \mp \frac{2}{3}, \\ g_{5,6} &= g_{7,8} = \pm \frac{1}{3}.\end{aligned}$$

В заключение отметим, что при относительном движении атомов направление вектора \mathbf{R} в пространстве изменяется. Поэтому между рассмотренными, почти вырожденными состояниями (1), являющимися собственными векторами «мгновенного» гамильтониана, будут возникать переходы, см. в связи с этим 13.89.

11.56. Потенциал взаимодействия $U(R) = \Delta E(R)$ определяется изменением энергии ΔE валентного электрона, вызванным его дополнительным взаимодействием с другим атомом. Это взаимодействие можно описать короткодействующим потенциалом $U_s(r)$ с радиусом действия порядка атомного размера. Ввиду того, что область локализации валентного электрона по условию задачи достаточно велика: $L \approx \kappa_0^{-1} \gg a_B$, сдвиг уровня определяется формулой теории возмущений по длине рассеяния

$$U(R) = \Delta E(R) \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m} |\Psi^{(0)}(R)|^2 a_s, \quad (1)$$

где $\Psi^{(0)}(r)$ — невозмущенная в.ф. валентного s -электрона, a_s — длина рассеяния электрона на «чужом» атоме, см. 11.4 и 4.29.

Сделаем несколько заключительных замечаний в отношении условий применимости выражения (1).

1) Предполагается, что $|a_s| \ll L$, см. 11.4. Это означает, что не существует слабосвязанного отрицательного иона для «чужого» атома.

2) Эта формула справедлива для расстояний $R \sim L$. На больших расстояниях она приводит к экспоненциально малому сдвигу. При этом взаимодействие атомов будет определяться ван-дер-ваальсовскими силами (считается, что оба атома находятся в S -состояниях).

3) Формула (1) требует уточнения в случае, когда орбитальный момент l слабосвязанного электрона отличен от нуля. Теперь взаимодействие будет зависеть от значения проекции момента на направление вектора \mathbf{R} . Если $l_z = 0$, то потенциал по-прежнему описывается выражением (1). В случае же $l_z \neq 0$ формула (1) дает $U(R) = 0$; при этом сдвиг уровня будет определяться взаимодействием электрона с атомом в состоянии с относительным моментом, равным $|l_z|$.

4) Отметим, что формула (1) описывает также взаимодействие отрицательного иона со слабосвязанным внешним электроном с «чужим» атомом (для «своего» атома заведомо не выполнено условие 1), см. в связи с этим 11.54).

11.57. Ввиду малости времени пролета β -электрона через атом, в результате его взаимодействия с атомным электроном состояние последнего не успевает заметно измениться и задачу можно решать в приближении внезапных воздействий, считая

что гамильтониан электрона до распада ядра \hat{H}_1 , в момент распада мгновенно превращается в \hat{H}_2 , здесь ³⁹⁾

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2} \Delta - \frac{1}{r}, \quad \hat{H}_2 = -\frac{1}{2} \Delta - \frac{2}{r}.$$

При этом в. ф. атомного электрона непосредственно сразу после распада ядра (в момент времени $t = 0$), как и до его распада, имеет вид

$$\Psi_{1s}(r, Z) = \sqrt{Z^3/\pi} e^{-Zr} \quad \text{с} \quad Z = 1.$$

Изменение энергии атомного электрона происходит только в момент распада ядра, а при $t > 0$ среднее значение ее уже не зависит от времени и равно

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \langle 1s, Z = 1 | \hat{H}_2 | 1s, Z = 1 \rangle \equiv \\ &\equiv \langle 1s, 1 | \hat{H}_1 - \frac{1}{r} | 1s, 1 \rangle = -\frac{3}{2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Таким образом, средняя приобретаемая при распаде ядра энергия атома (за счет β -электрона) составляет

$$\bar{E}_{\text{пр}} = \bar{E} - E_0 = -1 \text{ а. е.} = -27,2 \text{ эВ}$$

($\bar{E}_{\text{пр}} < 0$, т. е. энергия атома (иона) уменьшается).

Вероятность электрону остаться в основном состоянии образующегося при распаде ядра иона гелия согласно исходной формуле теории внезапных воздействий, см. 8.47, составляет

$$\omega_{1s \rightarrow 1s} = \left| \int \Psi_{1s}(r, Z = 2) \Psi_{1s}(r, Z = 1) dV \right|^2 = \frac{512}{729} \approx 0,70. \quad (2)$$

Аналогично, учитывая вид в. ф. $2s$ -состояния водородоподобного атома (иона гелия при $Z = 2$)

$$\Psi_{2s}(r, Z) = \sqrt{Z^3/8\pi} (1 - Zr/2) e^{-Zr/2},$$

находим вероятность перехода в это состояние

$$\omega_{1s \rightarrow 2s} = \left| \int \Psi_{2s}(r, Z = 2) \Psi_{1s}(r, Z = 1) dV \right|^2 = \frac{1}{4}. \quad (3)$$

Заметим, что ввиду сферической симметрии гамильтонианов $\hat{H}_{1,2}$ в приближении мгновенного вылета β -электрона орбитальный момент атомного электрона сохраняется, и так как он равен нулю в исходном состоянии, то после распада ядра возмож-

³⁹⁾ Эффект отдачи ядра при распаде также несуществен, сравнить с 11.58. Поэтому ядро на всех стадиях процесса считается неподвижным и находящимся в начале координат.

ны переходы электрона лишь в s -состояния. При распаде ядра может произойти ионизация атома (иона), т. е. переход атомного электрона в состояния непрерывного спектра с $E > 0$; при этом угловое распределение вылетающих электронов изотропное. Впрочем, вероятность ионизации мала, как это видно из рассчитанных значений вероятностей (2) и (3).

11.58. Обычно под в. ф. атома понимают волновую функцию электронной оболочки $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ (спиновые переменные для краткости записи опущены), а атомное ядро считается неподвижным и находящимся в начале координат. При этом свободное равномерное движение ядра (положение которого практически совпадает с центром масс системы) не влияет на состояние электронов. Для определения изменения состояния атома при внезапной передаче ядру импульса $\mathbf{P} = M\mathbf{V}$ (M — масса ядра) замечаем, что в силу принципа относительности Галилея оно эквивалентно изменению состояния системы при внезапном же изменении на $\mathbf{p} = -m\mathbf{V}$ импульсов всех электронов (и прежнем импульсе ядра). Соответственно в. ф. электронной оболочки сразу после «встряхивания» принимает вид

$$\tilde{\Psi}_0 = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} m\mathbf{V} \sum_a \mathbf{r}_a\right) \Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (1)$$

где Ψ_0 — в. ф. непосредственно перед «встряхиванием», сравнить с 6.26. Дальнейшая эволюция волновой функции атомных электронов определяется уравнением Шрёдингера, а вероятности возбуждения различных стационарных состояний атома

$$\omega_{0 \rightarrow n} = |\langle \Psi_n | \tilde{\Psi}_0 \rangle|^2 = \left| \int \Psi_n^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} m\mathbf{V} \sum_a \mathbf{r}_a\right) \Psi_0 d\tau \right|^2 \quad (2)$$

от времени не зависят, сравнить с 8.47.

В частности, для водородоподобного атома, находящегося в основном, $1s$ -состоянии, вероятность остаться в исходном состоянии согласно формуле (2) равна ($\mathbf{q} = m\mathbf{P}/\hbar M$):

$$\omega_0 = \left| \frac{Z^3}{\pi a_B^3} \int \exp\left(-\frac{2Zr}{a_B} - i\mathbf{q}\mathbf{r}\right) dV \right|^2 = \frac{1}{(1 + q^2 a_B^2 / 4Z^2)^4}. \quad (3)$$

При этом суммарная вероятность возбуждения и ионизации атома $\omega = 1 - \omega_0$. Для нее в предельных случаях слабого, $qa_B/Z \ll \ll 1$, и сильного, $qa_B/Z \gg 1$, «встряхивания» имеем

$$\omega \approx \begin{cases} q^2 a_B^2 / Z^2 \ll 1, & qa_B/Z \ll 1, \\ 1 - (2Z/qa_B)^8 \approx 1, & qa_B/Z \gg 1 \end{cases}$$

(заметим, что $qa_B/Z \equiv V/v_{ат}$, где $v_{ат} = Z\hbar/ma_B$ — характерная скорость электрона в исходном состоянии).

11.59. Имея в виду адиабатическое приближение для $dt\mu$ -системы, см. 11.30, замечаем, что когда дейтрон и тритон сближаются до ядерных расстояний, на которых протекает реакция синтеза $dt \rightarrow p\alpha$, волновая функция мюона сводится к в. ф. основного состояния водородоподобного атома с зарядом ядра $Z = 2$. Далее, в результате реакции образуется быстрая α -частица (ядро ${}^4\text{He}$) и вероятность подхвата ею мюона, т. е. образования мюонного атомного иона $(\mu\alpha)^+$, определяется формулой (2) предыдущей задачи. Доминирующую роль играет подхват мюона в основное состояние, вероятность ω_0 которого рассчитывается непосредственно по формуле (3) этой задачи, если в ней положить $Z=2$, а под a_B понимать мюонный радиус Бора. Значение q^2 при этом определяется энергосвободением 17,6 МэВ в реакции $dt \rightarrow p\alpha$, из которых 3,52 МэВ приходится на α -частицу. Учитывая, что $m_\mu = 207m_e$, $m_\alpha = 7286m_e$, находим $q^2 a_B^2 \approx 35,5$ и соответственно $\omega_0 \approx 9,3 \cdot 10^{-3}$. Таким образом, один мюон может вызвать около 100 актов реакции $dt \rightarrow p\alpha$. Более точные расчеты, учитывающие адиабатические поправки в волновой функции, конечность отношения m_μ/m_α , а также и переходы в другие связанные состояния системы $(\mu\alpha)^+$ приводят к числу ≈ 160 актов реакции синтеза (при этом отношения времени жизни мюона как ко времени образования $dt\mu$ -системы освободившимся мюоном, так и ко времени протекания реакции синтеза в мезомолекулярном ионе, см. 11.74, существенно больше этого числа).

11.60. Волновая функция всей системы непосредственно перед «встряхиванием» имеет вид

$$\Psi_{\text{сист}} = \Psi(\mathbf{R}_{\text{ц. м}}) \cdot \Psi_0(\rho_1 - \mathbf{R}_{\text{ц. м}}, \dots, \rho_N - \mathbf{R}_{\text{ц. м}}; \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2).$$

Здесь в. ф. $\Psi(\mathbf{R}_{\text{ц. м}})$ описывает движение центра масс системы, а Ψ_0 является волновой функцией «внутреннего» состояния молекулы. Именно ее имеют в виду, когда говорят о состоянии молекулы, сравнить с 11.40, при этом $\mathbf{r}_a = \rho_a - \mathbf{R}_{\text{ц. м}}$ являются радиусами-векторами электронов относительно центра масс молекулы.

Считая, что импульс \mathbf{P} передается ядру 1, радиус-вектор которого \mathbf{R}_1 , имеем в. ф. системы сразу после «встряхивания» в виде

$$\tilde{\Psi}_{\text{сист}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \mathbf{R}_1\right) \Psi_{\text{сист}}. \quad (1)$$

Учитывая соотношение ($\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$, $M = M_1 + M_2$)

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_{\text{ц. м}} + \frac{M_2}{M} \mathbf{R} - \frac{m}{M} \sum_a (\rho_a - \mathbf{R}_{\text{ц. м}}),$$

из формулы (1) находим изменение волновой функции молекулы в результате «встряхивания» (сравнить с (1) из 11.58 для атома):

$$\tilde{\Psi}_0 = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{M_2}{M} \mathbf{P} \mathbf{R} - \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{m}{M} \mathbf{P} \sum_a \mathbf{r}_a \right\} \Psi_0(r_1, \dots, r_N; \mathbf{R}).$$

Теперь вероятности переходов в молекуле вычисляются по обычной формуле $\omega(0 \rightarrow n) = |\langle \Psi_n | \tilde{\Psi}_0 \rangle|^2$, при этом в матричном элементе проводится интегрирование по координатам всех электронов, относительному расстоянию между ядрами R и по углам, определяющим ориентацию оси молекулы (а также суммирование по спиновым переменным).

Для молекулы с электронным термом ${}^1\Sigma$ вероятность остаться в исходном состоянии с квантовыми числами $K = v = 0$ с учетом вида в. ф. из 11.40 определяется выражением

$$\omega_0 = \left| \int \exp \left\{ \frac{iM_2 \mathbf{P} \mathbf{R}}{\hbar M} - \frac{im \mathbf{P}}{\hbar M} \sum_a \mathbf{r}_a \right\} \times \right. \\ \left. \times |\Psi_n^{\text{эл}} \Psi_0^{\text{кол}} \Psi_{00}^{\text{вр}}|^2 d\tau_{\text{эл}} dR d\Omega_{\mathbf{R}} \right|^2. \quad (2)$$

Так как по условию $P/M \ll v_{\text{эл}} \sim \hbar/ma_{\text{в}}$, а характерные значения координат электронов $r \sim a_{\text{в}}$, то, заменив множитель $\exp \left\{ -i(m\mathbf{P}/\hbar M) \sum_a \mathbf{r}_a \right\}$ единицей, в (2) получим

$\int |\Psi_n^{\text{эл}}|^2 d\tau_{\text{эл}} = 1$ (это соответствует тому, что изменение электронного терма в условиях задачи происходит с малой вероятностью). Выполним далее интегрирование по углам (что легко сделать, направив полярную ось вдоль вектора \mathbf{P})

$$\frac{1}{4\pi} \int \exp \left\{ i \frac{M_2 P R \cos \theta}{\hbar M} \right\} d\Omega_{\mathbf{R}} = \frac{\sin \alpha R}{\alpha R}, \quad \alpha = \frac{M_2 P}{\hbar M} = \frac{\mu V}{\hbar}$$

(μ — приведенная масса ядер), приводим выражение (2) к виду

$$\omega_0 = \left| \int \frac{1}{2\alpha R} (e^{i\alpha R} - e^{-i\alpha R}) |\Psi_0^{\text{кол}}(R)|^2 dR \right|^2. \quad (3)$$

Волновая функция

$$\Psi_0^{\text{кол}} = (\mu\omega_e/\pi\hbar)^{1/4} \exp \left[-\mu\omega_e (R - R_0)^2 / 2\hbar \right]$$

существенно отлична от нуля лишь в области значений

$$|R - R_0| \leq (\hbar/\mu\omega_e)^{1/2} \ll R_0 \sim a_{\text{в}}$$

(R_0 — равновесное расстояние между ядрами молекулы, ω_e — частота колебаний). Поэтому при вычислении интеграла в (3) значение R в знаменателе можно заменить на R_0 , после чего он вычисляется элементарно, так как

$$\int |\Psi_0^{\text{кол}}(R)|^2 e^{\pm i\alpha R} dR = \\ = \left(\frac{\mu\omega_e}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{\pm i\alpha R_0} \int \exp\left[-\frac{\mu\omega_e}{\hbar}(R-R_0)^2 \pm i\alpha(R-R_0)\right] dR = \\ = \exp(\pm i\alpha R_0 - \hbar\alpha^2/4\mu\omega_e)$$

(ввиду быстрой сходимости интегрировать можно в бесконечных пределах).

В результате окончательное выражение для вероятности молекуле остаться в исходном состоянии с квантовыми числами $K = v = 0$ принимает вид

$$w_0 = \left(\frac{\sin \alpha R_0}{\alpha R_0}\right)^2 \cdot \exp\left(-\frac{\hbar\alpha^2}{2\mu\omega_e}\right). \quad (4)$$

Появление в нем двух сомножителей имеет простой смысл. Первый из них, $[(\sin \alpha R_0)/\alpha R_0]^2$, определяет вероятность того, что не возбуждаются вращения. Он становится заметно отличным от 1 лишь при условии $\alpha R_0 \geq 1$, или $\mu V R_0 \geq \hbar$. Это — естественный физический результат, если учесть, что $\mu V R_0$ характеризует величину передаваемого молекуле момента, и иметь в виду условие квантования момента. Второй сомножитель в выражении (4) определяет вероятность того, что не возбуждаются колебания молекулы. Как видно, условие возбуждения их $\hbar\alpha^2 \geq \mu\omega_e$, или $\mu V^2 \geq \hbar\omega_e$, что не требует комментария.

11.61. Физическая причина существенного влияния магнитного поля на время жизни позитрония определяется тем обстоятельством, что оно «перемешивает» орто- и парасостояния, см. 11.43, имеющие сильно различающиеся времена жизни. Времена жизни возникающих при этом квазистационарных состояний определяются соотношением

$$\frac{1}{\bar{\tau}_i} = w_0^{(i)} \cdot \frac{1}{\tau_0} + w_1^{(i)} \cdot \frac{1}{\tau_1}, \quad (1)$$

где $w_{0(1)}^{(i)} = |C_{0(1)}^{(i)}|^2$ являются вероятностями нахождения позитрония в пара- (орто-)состоянии. Спинные функции для основного состояния позитрония в магнитном поле были установлены в 11.43. Так как состояния ортопозитрония с проекцией спина $S_z = \pm 1$ на направление магнитного поля остаются (квази)стационарными и не искажаются слабым полем, то время жизни их не изменяется.

Совершенно иная ситуация имеет место для состояний с $S_z = 0$. Теперь магнитное поле «перемешивает» орто- и парасостояния. Воспользовавшись результатами 11.43 для коэффициентов $C_{0(1)}^{(i)}$, согласно (1) находим

$$\bar{\tau}_{1(2)}^{-1} = \frac{y \pm 1}{2y} \cdot \frac{1}{\tau_0} + \frac{y \mp 1}{2y} \cdot \frac{1}{\tau_1}. \quad (2)$$

Здесь $y = \sqrt{1 + (4\mu_B \mathcal{H} / \Delta)^2}$ (Δ — тонкое расщепление основного уровня позитрония), знаки $+$ и $-$ соответствуют состояниям 1 и 2, первое из которых при выключении магнитного поля описывает парапозитроний, а второе — ортопозитроний. Так как $\tau_1 \gg \tau_0$, то из (2) видно, что даже слабое магнитное поле сильно влияет на время жизни ортопозитрония, уменьшая его:

$$\bar{\tau}_2 \approx \left(1 + \frac{4\mu_B^2 \mathcal{H}^2}{\Delta^2} \cdot \frac{\tau_1}{\tau_0} \right)^{-1} \tau_1, \quad \mu_B \mathcal{H} \ll \Delta \quad (3)$$

(этот результат непосредственно следует из выражения (1), если в нем воспользоваться значениями коэффициентов $C_1^{(2)} \approx 1$ и $C_2^{(2)} \approx 2\mu_B \mathcal{H} / \Delta$ согласно формуле (VIII.2) теории возмущений).

По мере увеличения магнитного поля значение $\bar{\tau}_1$ также увеличивается, а $\bar{\tau}_2$ уменьшается и в сильном поле, когда $\mu_B \mathcal{H} \gg \Delta$, эти времена жизни сравниваются: $\bar{\tau}_1 \approx \bar{\tau}_2 \approx \tau_0 / 2$ (при этом в рассматриваемых состояниях 1 и 2 с равной вероятностью представлены орто- и парасостояния позитрония).

11.62. Физическая причина сильного влияния даже слабого электрического поля на время жизни $2s$ -состояния атома водорода состоит в том, что оно «перемешивает» его с $2p$ -состоянием, а последнее уже быстро излучает фотон, переходя в основное состояние; сравнить с предыдущей задачей. Выделенность $2p$ - (и особенно $2p_{1/2}$ -) состояний определяется почти вырожденностью их по энергии с $2s$ -состоянием. Схема уровней, возникающих из нерелятивистского уровня $E_{n=2}$ атома водорода за счет релятивистских и так называемых *радиационных*, см. [28], поправок, приведена на рис. 40. При этом $\Delta_{LS} / 2\pi\hbar = 1058$ МГц — лэмбовский сдвиг, а $\Delta_{FS} / 2\pi\hbar \approx 1,1 \cdot 10^4$ МГц — тонкая структура.

При наложении слабого электрического поля вместо «чистого» $2s_{1/2}$ -состояния возникает суперпозиция

$$\Psi_E \approx C_1 \Psi_{2s_{1/2}} + C_2 \Psi_{2p_{1/2}},$$

в которой мы ограничились лишь состоянием $2p_{1/2}$ ввиду малости Δ_{LS} по сравнению с Δ_{FS} (см. ниже). Время жизни такого

$$\frac{1}{\tau} = |C_1|^2 \cdot \frac{1}{\tau_{2s}} + |C_2|^2 \cdot \frac{1}{\tau_{2p}}.$$

Как обычно, из уравнения Шрёдингера, $\hat{H}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$, последовательным умножением на $\langle 2s_{1/2}|$ и $\langle 2p_{1/2}|$ получаем

$$V^*C_2 = E^{(1)}C_1, \quad VC_1 = (E^{(1)} + \Delta_{LS})C_2,$$

где $E^{(1)}$ — энергия состояния, отсчитываемая от невозмущенного уровня $E_{2s}^{(0)}$, а

$$V = \langle 2p_{1/2}| e\mathcal{E}z | 2s_{1/2}\rangle = i\sqrt{3} ea_B \mathcal{E}. \quad (1)$$

Этот матричный элемент возмущения вычисляется для состояний с одинаковыми значениями проекции момента $j_z = \pm 1/2$ на направление электрического поля и лишь множителем ⁴⁰⁾ $1/\sqrt{3}$ отличается от матричного элемента $\langle 2p_0| e\mathcal{E}z | 2s\rangle$, вычисленного в 11.33 в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием.

Мы не будем приводить общего решения ⁴¹⁾ системы уравнений (1), определяющего сдвиги $2s_{1/2}$ - и $2p_{1/2}$ -уровней и значения соответствующих коэффициентов C_i , а ограничимся лишь предельными случаями.

При выполнении условия $ea_B \mathcal{E} \ll \Delta_{LS}$ для коэффициентов C_i , описывающих искажение в. ф. $2s$ -состояния электрическим полем, можно воспользоваться результатом теории возмущений (VIII. 2), согласно которому $C_{2s} \approx 1$ и $C_{2p_{1/2}} \approx V/\Delta_{LS}$, и получить для времени жизни рассматриваемого состояния выражение

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{2s}} + \frac{3e^2 a_B^2 \mathcal{E}^2}{\Delta_{LS}^2} \cdot \frac{1}{\tau_{2p}}. \quad (2)$$

Заметим, что при этом $C_{2p_{3/2}} = \sqrt{2} V/(\Delta_{LS} - \Delta_{FS})$ и поправка связанная с учетом $2p_{3/2}$ -состояния, составляет $\approx 4\%$ от второго слагаемого в правой части соотношения (2).

В случае же $ea_B \mathcal{E} \gg \Delta_{LS}$ (отметим, что $\mathcal{E}_0 = \Delta_{LS}/ea_B \approx \approx 800$ В/см) в рассматриваемой суперпозиции $2s$ - и $2p$ -состояния представлены с одинаковой вероятностью и теперь $\tau \approx \tau_{2p}/2$.

⁴⁰⁾ Он представляет соответствующий коэффициент Клебша — Гордана, его значение следует, например, из результата задачи 5.18.

⁴¹⁾ Оно может быть получено в результате очевидных переобозначений из формул, дающих решение задач 11.61 и 11.43 (для состояний с $S_z = 0$).

В заключение отметим, что как в данной, так и в предыдущей задачах ширины рассматриваемых состояний $\Gamma = \hbar/\tau$ малы по сравнению с расстоянием ΔE между невозмущенными уровнями. В аналогичных задачах в случае $\Gamma \geq \Delta E$ необходимо учитывать *затухание* состояний, см. в связи с этим [14, с. 118].

11.63. Воспользуемся общей формулой для вероятности перехода в единицу времени из состояния дискретного спектра в состояния непрерывного спектра под действием периодического возмущения

$$dw_{\nu} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{\nu n}|^2 \delta(E_{\nu} - E_n^{(0)} - \hbar\omega) d\nu, \quad (1)$$

см. [1, § 42]. В рассматриваемой задаче возмущение имеет вид

$$\hat{V} = -e\mathcal{E}(t)\mathbf{r} \equiv \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}^{\dagger}e^{i\omega t},$$

причем

$$\hat{F} = -e\mathcal{E}_0(x + i\zeta y)/2.$$

В матричном элементе возмущения $F_{\nu n} = \langle \Psi_{\nu}^{(0)} | \hat{F} | \Psi_n^{(0)} \rangle$ под в. ф. $\Psi_n^{(0)}$ исходного состояния следует понимать в. ф.

$$\Psi_0 = \sqrt{\kappa_0/2\pi} e^{-\kappa_0 r}/r$$

основного состояния частицы в потенциале нулевого радиуса, см. 4.10. Выбрав в качестве ⁴²⁾ ν волновой вектор \mathbf{k} вылетающей при ионизации частицы на бесконечности, под $\Psi_{\nu}^{(0)}$ следует понимать волновые функции $\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$, см. [1, § 136]. Однако в условиях рассматриваемой задачи вместо $\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ можно воспользоваться волновыми функциями свободной частицы $\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)} = (2\pi)^{-3/2} \times \times e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Это связано с тем, что в случае потенциала нулевого радиуса $\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ отличается от $\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)}$ лишь слагаемыми, отвечающими моменту $l = 0$ (на частицу с $l \neq 0$ п. н. р. не оказывает влияния), а их вклад в матричный элемент $\langle \Psi_{\mathbf{k}}^{(-)} | \hat{F} | \Psi_0 \rangle$ равен нулю.

Таким образом,

$$F_{\nu n} = -\frac{e\sqrt{\kappa_0}\mathcal{E}_0}{8\pi^2} \int \frac{x + i\zeta y}{r} e^{-\kappa_0 r - i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV. \quad (2)$$

⁴²⁾ Напомним, что ν представляет набор квантовых чисел для описания невозмущенных состояний непрерывного спектра. Еще один удобный набор $\nu = (k, l, m)$, где l — момент вылетающей частицы. При этом матричный элемент возмущения отличен от нуля лишь для значения $l = 1$, а соответствующие в. ф. $\Psi_{\nu}^{(0)}$ совпадают с в. ф. $\Psi_{klm}^{(0)}$ свободной частицы, см. 11.35.

Входящий сюда интеграл равен

$$i \left(\frac{\partial}{\partial k_x} + i\zeta \frac{\partial}{\partial k_y} \right) \int \frac{1}{r} e^{-\kappa_0 r - i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV = \\ = i \left(\frac{\partial}{\partial k_x} + i\zeta \frac{\partial}{\partial k_y} \right) \frac{4\pi}{\kappa_0^2 + k^2} \quad (3)$$

(он вычисляется в сферических координатах с полярной осью, направленной вдоль вектора \mathbf{k}). Учитывая, что

$$d\mathbf{v} \equiv d^3k = k^2 dk d\Omega_k = mk dE_k d\Omega_k / \hbar^2$$

и выполняя в формуле (1) интегрирование по $E_k \equiv E_{\mathbf{v}}$, получаем

$$\frac{d\omega}{d\Omega_k} = \frac{2e^2 m \kappa_0 k^3 \mathcal{E}_0^2}{\pi \hbar^3 (\kappa_0^2 + k^2)^4} \sin^2 \theta \cdot (\cos^2 \varphi + \zeta^2 \sin^2 \varphi), \quad (4)$$

при этом направление полярной оси выбрано вдоль оси z , так что $k_x = k \sin \theta \cdot \cos \varphi$; так как $E_0^{(0)} = -\hbar^2 \kappa_0^2 / 2m$, то для вылетающих частиц $\hbar k = \sqrt{2m\hbar\omega - \hbar^2 \kappa_0^2}$.

Отметим следующие закономерности в угловом распределении вылетающих частиц. При значениях $\zeta = \pm 1$ (отвечающих круговой поляризации) имеем

$$d\omega/d\Omega_k \propto \sin^2 \theta,$$

что соответствует частице с моментом $l = 1$ и его проекцией $l_z = \pm 1$. В случае $\zeta = 0$ (линейная поляризация волны вдоль оси x) угловое распределение

$$d\omega/d\Omega_k \propto \cos^2 \theta',$$

где θ' — угол между вектором \mathbf{k} и осью x , что соответствует вылетающей частице с $l = 1$ и $l_z = 0$.

Выполнив в выражении (4) интегрирование по углам, получаем полную вероятность ионизации в единицу времени

$$\omega = \frac{2e^2 (1 + \zeta^2)}{3\hbar m} \cdot \frac{\sqrt{\omega_0} (\omega - \omega_0)^{3/2}}{\omega^4} \mathcal{E}_0^2, \quad (5)$$

здесь $\omega_0 = \hbar \kappa_0^2 / 2m$ — пороговая частота ионизации. Отметим, что зависимость

$$\omega \propto (\omega - \omega_0)^{3/2} \propto k^3 \quad \text{при} \quad \omega \rightarrow \omega_0$$

определяется значением момента ($\omega \propto k^{2l+1}$) вылетающей частицы, равным $l = 1$, и связана с проникаемостью центробежного барьера для медленных частиц, сравнить с 9.30.

Сделаем несколько заключительных замечаний.

1) При $\omega < \omega_0$ вероятность ионизации согласно (1), (5) равна нулю. В этом случае она определяется более высокими порядками теории возмущений.

2) Отметим, что обобщение полученных результатов (4) и (5) на случай ионизации состояния с малой энергией связи и моментом $l = 0$ в короткодействующем потенциале $U_s(r)$, учитывающее конечность его радиуса, $r_s \neq 0$, получается введением в эти формулы множителя $C_{\kappa 0}^2$, сравнить с 11.36.

3) Подчеркнем, что кроме обычного условия применимости теории возмущений, $|F_{\nu n}| \ll |E_\nu - E_n|$, или $em\mathcal{E}_0/\hbar^2\kappa_0^3 \ll 1$, справедливость выражений (4) и (5) предполагает выполнение еще двух условий: $\kappa_0 r_s \ll 1$ и $kr_s \ll 1$. Первое из них отражает слабосвязанный характер рассматриваемого состояния, а второе накладывает ограничение на частоту волны, $\hbar\omega \ll \hbar^2/mr_s^2$. В противном случае в интеграле матричного элемента $F_{\nu n}$ существенную роль будет играть область расстояний $r \lesssim r_s$ (в случае $kr_s \gtrsim 1$ это связано с быстрыми осцилляциями e^{ikr}), в которой волновые функции $\Psi_n^{(0)}$ и $\Psi_k^{(-)}$ уже зависят от конкретного вида потенциала и замена его потенциалом нулевого радиуса не оправдана.

4) Рассматриваемое состояние в периодическом во времени поле волны, строго говоря, является уже *квазиэнергетическим*, см. § 5 главы 6. Соответственно по формуле (8) из 8.42 можно рассчитать его квазиэнергию, мнимая часть которой определяет ширину этого КЭС, связанную с вероятностью ионизации (5) соотношением $\Gamma = \hbar\omega$, см. в связи с этим 11.66.

Отметим, наконец, что в последнее время интенсивно исследовалось поведение атомных систем в поле сильной волны, см. монографию [21].

11.64. Задача решается аналогично предыдущей. Ввиду слабосвязанного характера рассматриваемого состояния, $\kappa_0 r_s \ll 1$, и предполагаемого ограничения на частоту волны $\hbar\omega \ll \hbar^2/mr_s^2$, в матричном элементе возмущения $\langle \nu | e^{\mathcal{E}z} | n \rangle$ (ось z направлена вдоль вектора $\mathcal{E}(t)$) существенную роль играет область больших расстояний⁴³⁾ $r \gg r_s$, на которых для волновой функции исходного состояния $\Psi_n^{(0)} \equiv \Psi_{\kappa, l=1, m}$ можно воспользоваться выражением (1) из задачи 11.37. Волновую функцию конечного состояния, как и в 11.63, можно взять в виде плоской волны $\Psi_k^{(-)} = \Psi_k^{(0)}$ (это связано с тем, что вылетающая частица являет-

⁴³⁾ Сравнить со случаем статического электрического поля в условиях задачи 11.37.

ся медленной, $kr_s \ll 1$, и соответственно малы фазовые сдвиги $\delta_l \sim (kr_s)^{2l+1}$, см. (XIII.15), определяющие при $r > r_s$ отличие радиальных в.ф. от случая свободной частицы). С учетом этих замечаний и выражения $Y_{lm}(n) = a_l(m) x_l/r$ для шаровой функции, см. 3.41, матричный элемент возмущения можно преобразовать к виду

$$\langle k | e\mathcal{E}_0 z | \kappa 1 m \rangle = - \frac{e\kappa_0 C_{\kappa 1} \mathcal{E}_0}{\sqrt{2} \pi^2} a_l(m) \frac{\partial}{\partial k_z} \frac{\partial}{\partial k_i} \int r^{-3/2+\varepsilon} e^{-ikr} K_{3/2}(\kappa_0 r) dV, \quad (1)$$

причем $\varepsilon \rightarrow 0$ ($\varepsilon > 0$; сразу полагать $\varepsilon = 0$ нельзя из-за возникновения «искусственной» расходимости интеграла, которая устраняется после дифференцирования по k_i). Интеграл здесь после выполнения интегрирования по углам в сферических координатах с полярной осью, направленной вдоль вектора k , принимает вид

$$\begin{aligned} & \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty r^{-1/2+\varepsilon} \sin kr \cdot K_{3/2}(\kappa_0 r) dr = \\ & = \pi \left(\frac{2}{\kappa_0} \right)^{3/2+\varepsilon} \Gamma\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2} + \frac{\varepsilon}{2}\right) F\left(\frac{3+\varepsilon}{2}, \frac{\varepsilon}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{k^2}{\kappa_0^2}\right), \end{aligned} \quad (2)$$

см. [33, с. 761], где F — гипергеометрическая функция:

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha \cdot \beta}{\gamma} \cdot \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1) \cdot \beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)} \cdot \frac{z^2}{2!} + \dots, \quad |z| < 1.$$

Замечая, что при $\varepsilon \rightarrow 0$

$$F(\gamma + \varepsilon, \varepsilon, \gamma, z) \approx 1 + \varepsilon \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} = 1 - \varepsilon \ln(1-z)$$

и $\Gamma(\varepsilon) \approx \varepsilon^{-1}$, интеграл в выражении (1) согласно (2) можно записать в виде

$$B(\kappa_0, \varepsilon) = \sqrt{\frac{2\pi^3}{\kappa_0^3}} \ln\left(\frac{k^2 + \kappa_0^2}{\kappa_0^2}\right).$$

Первое слагаемое здесь, расходящееся $\propto 1/\varepsilon$ при $\varepsilon \rightarrow 0$, не зависит от k и поэтому не вносит вклада в значение матричного элемента (1).

Теперь, учитывая приведенную выше связь $a_i(m)$ с $Y_{1m}(\pi)$, находим значение выражения

$$a_i(m) \frac{\partial}{\partial k_z} \frac{\partial}{\partial k_i} \ln(k^2 + \kappa_0^2) = \\ = \frac{-4k \cos \theta \cdot Y_{1m}\left(\frac{k}{k}\right) + 2i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (k^2 + \kappa_0^2) \delta_{m,0}}{(k^2 + \kappa_0^2)^2},$$

определяющего фактически матричный элемент возмущения (1), и получаем угловое распределение вылетающей при ионизации частицы

$$\frac{d\omega}{d\Omega} = \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2 C_{\kappa 1}^2 \sqrt{\omega - \omega_0}}{2\hbar m \omega^4 \sqrt{\omega_0}} \left| \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \omega \delta_{l_z, 0} + \right. \\ \left. + 2i(\omega - \omega_0) \cos \theta Y_{1l_z}\left(\frac{k}{k}\right) \right|^2, \quad (4)$$

сравнить с выводом формулы (4) из 11.63.

Обсудим полученный результат (4).

При ионизации из состояний с проекцией момента $l_z = \pm 1$, угловое распределение вылетающей частицы описывается выражением

$$\frac{d\omega}{d\Omega} \propto \cos^2 \theta \cdot \sin^2 \theta \propto |Y_{21}|^2,$$

что соответствует частице, имеющей момент $l = 2$ и $l_z = \pm 1$. При этом на пороге ионизации, т. е. при $\omega \rightarrow \omega_0 = \hbar \kappa_0^2 / 2m$, имеем $d\omega/d\Omega \propto (\omega - \omega_0)^{5/2}$, как и следует ($\propto k^{2l+1}$) при моменте $l = 2$; сравнить с предыдущей задачей.

В случае значения $l_z = 0$ у связанной частицы угловое распределение (4) описывает интерференцию s - и d -волн; при этом на пороге доминирует s -волна и

$$d\omega/d\Omega \propto (\omega - \omega_0)^{1/2} \quad \text{при } \omega \rightarrow \omega_0.$$

Выполнив в выражении (4) интегрирование по углам, находим полную вероятность ионизации в единицу времени. Для частицы, имеющей в исходном состоянии момент $l = 1$ и его проекцию $l_z = \pm 1$, получаем

$$\omega_{l_z = \pm 1} = \frac{2e^2 C_{\kappa 1}^2 \mathcal{E}_0^2 (\omega - \omega_0)^{5/2}}{5m\hbar \omega^4 \sqrt{\omega_0}}, \quad (5)$$

а для частицы с $l = 1$ и $l_z = 0$

$$\omega_{l_z=0} = \frac{e^2 C_{\kappa_1}^2 \mathcal{E}_0^2 \sqrt{\omega - \omega_0} (7\omega^2 - 4\omega\omega_0 + 12\omega_0^2)}{10m\hbar\omega^4 \sqrt{\omega_0}}. \quad (6)$$

11.65. Как и в двух предыдущих задачах, расчет вероятности ионизации выполним по формуле (1) из 11.63. Теперь, однако,

$$\hat{F} = -\frac{i\mathcal{E}_0}{2\omega} (\hat{p}_x + i\xi\hat{p}_y), \quad \Psi_n^{(0)} \equiv \Psi_{1s} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr}$$

(используем атомные единицы), но по-прежнему $\Psi_v^{(0)} \approx \approx (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$.

Матричный элемент возмущения

$$F_{vn} = -\frac{i\sqrt{Z^3}\mathcal{E}_0}{4\sqrt{2}\pi^2\omega} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\hat{p}_x + i\xi\hat{p}_y) e^{-Zr} dV = \\ = -\frac{i\sqrt{2Z^5}\mathcal{E}_0}{4\pi\omega^3} (k_x + i\xi k_y)$$

(под интегралом операторы $\hat{p}_{x,y}$, перенеся их действие «налево», можно заменить на $k_{x,y}$, после чего он легко вычисляется в сферических координатах с полярной осью вдоль \mathbf{k} ; в приведенном выражении учтено, что $k \approx \sqrt{2\omega} \gg Z$). Соответственно вероятность ионизации в единицу времени с заданным направлением вылета электрона оказывается равной

$$\frac{d\omega}{d\Omega} = \frac{Z^5 \mathcal{E}_0^2}{\sqrt{2} \pi \omega^{9/2}} \sin^2 \theta \cdot (\cos^2 \varphi + \xi^2 \sin^2 \varphi). \quad (1)$$

Угловое распределение имеет такой же вид, как и в условиях задачи 11.63, см. формулу (4) этой задачи и связанный с ней комментарий.

Интегрирование выражения (1) по углам дает полную вероятность ионизации атома (иона) в единицу времени:

$$\omega(\omega) = \frac{64(1+\xi^2)}{3} Z^5 \left(\frac{a_B^2 \mathcal{E}_0}{e} \right)^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right)^{9/2} \omega_0, \quad \omega \gg Z^2 \omega_0, \quad (2)$$

здесь мы перешли к обычной системе единиц, $\omega_0 = me^4/\hbar^3$.

11.66. Динамическая поляризуемость $\beta_n(\omega)$ определяет изменение *квазиэнергии* (ее квадратичной по полю части) системы, находящейся в монохроматическом однородном электрическом поле, в квазиэнергетическом состоянии Ψ_{ϵ_n} . В случае линейно поляризованной волны, т. е. электрического поля вида $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$, КЭС характеризуются определенным значением

проекции момента на направление поля (выбираемое вдоль оси z), так что для их рассмотрения можно воспользоваться развитой в 8.42 теорией для невырожденных (в отсутствие возмущения) уровней. Отметим, что для состояний с отличным от нуля моментом в поле эллиптически поляризованной волны возникают осложнения, связанные с отысканием правильных функций нулевого приближения. Однако для исходных состояний с моментом $l = 0$ их нет, при этом изменение квазиэнергии описывается выражением

$$E_0^{(2)} = -\frac{1}{4}(1 + \zeta^2) \beta_0(\omega) \mathcal{E}_0^2,$$

где ζ — степень эллиптичности.

Итак, исходным для вычисления $\beta_0(\omega)$ является выражение (8) из 8.42, которое теперь принимает вид

$$\beta_0(\omega) = 2 \int \frac{\omega_{k0} |\langle \Psi_{\mathbf{k}}^{(-)} | z | \Psi_0 \rangle|^2 d^3k}{\omega_{k0}^2 - \omega^2 - i\gamma}, \quad (1)$$

здесь $\gamma > 0$ — бесконечно малая величина, волновые функции Ψ и $\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ такие же, как и в 11.63, $E_0 = -\kappa_0^2/2$ — энергия рассматриваемого невозмущенного состояния, $E_{\mathbf{k}} = k^2/2$ и $\omega_{k0} = (k^2 + \kappa_0^2)/2$, при этом используем систему единиц $e = \hbar = m = 1$.

Матричный элемент координаты z в выражении (1) был вычислен в 11.63. Его угловая часть $\propto k_z = k \cos \theta$, и после элементарного интегрирования по углам ($d^3k = k^2 dk d\Omega$) выражение (1) оказывается равным

$$\beta_0(\omega) = \frac{32\kappa_0}{3\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^4 dk}{(\kappa_0^2 + k^2)^3 [(\kappa_0^2 + k^2)^2 - 4\omega^2 - i\gamma]}. \quad (2)$$

Входящий сюда интеграл вычисляется с помощью вычетов замыканием контура интегрирования, например, в верхнюю полуплоскость комплексного переменного k . Вычисления можно несколько упростить, если предварительно выполнить простые алгебраические преобразования и записать сначала подынтегральную функцию в выражении (2) в виде

$$\frac{k^4}{4\omega^2 (\kappa_0^2 + k^2)} \left[-\frac{1}{(\kappa_0^2 + k^2)^2} + \frac{1}{(\kappa_0^2 + k^2)^2 - 4\omega^2 - i\gamma} \right]. \quad (3)$$

При этом интеграл от первого слагаемого в скобке вычисляется элементарно (и особенно просто, если записать в нем $(z + k^2)^{-3}$

с $z = \kappa_0^2$ как $d^2(z + k^2)^{-1}/2dz^2$ и вынести дифференцирование по z за знак интеграла). Оно дает вклад в $\beta_0(\omega)$, равный $-1/\omega^2$. Далее, записав слагаемое, отвечающее второму члену в скобке выражения (3), в виде

$$\frac{k^4}{32\omega^4} \left(-\frac{2}{\kappa_0^2 + k^2} + \frac{1}{\kappa_0^2 + k^2 - 2\omega - i\gamma} + \frac{1}{\kappa_0^2 + k^2 + 2\omega + i\gamma} \right) \quad (4)$$

($\omega > 0$), легко приходим к окончательному результату

$$\beta_0(\omega) = C_{\kappa_0}^2 \left[-\frac{1}{\omega^2} - \frac{2\kappa_0^4}{\omega^4} + \frac{\kappa_0}{3\omega^4} (\kappa_0^2 - 2\omega)^{3/2} + \frac{\kappa_0}{3\omega^4} (\kappa_0^2 + 2\omega)^{3/2} \right]. \quad (5)$$

Здесь мы ввели множитель $C_{\kappa_0}^2$ (квадрат асимптотического коэффициента), что соответствует обычному обобщенному результату, полученного для потенциала нулевого радиуса, на случай слабо-связанного состояния частицы с моментом $l = 0$ в короткодействующем потенциале $U_s(r)$, сравнить с 11.36 и 11.63.

Отметим ряд свойств выражения (5) для динамической поляризуемости.

1) Для малых частот, $\omega \ll \kappa_0^2$, имеем

$$\beta_0(\omega) \approx \beta_0 \left(1 + \frac{7\omega^2}{6\kappa_0^4} \right), \quad \text{где} \quad \beta_0 = \frac{1}{4\kappa_0^4} C_{\kappa_0}^2, \quad (6)$$

при этом β_0 воспроизводит значение статической поляризуемости из 11.36.

2) При значениях частоты $\omega > \kappa_0^2/2$ (выше порога ионизации) у $\beta_0(\omega)$ появляется мнимая часть, определяющая ширину Γ рассматриваемого состояния, $E^{(v)}$ $\equiv \Delta E - i\Gamma/2$,

$$\Gamma(\omega) = \frac{\sqrt{2}(1 + \xi^2)}{3\omega^4} \kappa_0 C_{\kappa_0}^2 \mathcal{E}_0^2 \left(\omega - \frac{\kappa_0^2}{2} \right)^{3/2}. \quad (7)$$

Наличие ширины квазиэнергетического уровня отражает возможность ионизации системы, вероятность которой в единицу времени $\omega = \Gamma$ (так как $\hbar = 1$) совпадает, естественно, с результатом из 11.63.

3) В случае потенциала нулевого радиуса $C_{\kappa_0}^2 = 1$ и из выражения (5) имеем $\beta_0(\omega) \approx -1/\omega^2$ при $\omega \rightarrow \infty$ в согласии с общим результатом, см. 6.40. Для потенциала же конечного радиуса r_s формула (5) применима лишь для не слишком больших частот $\omega \ll r_s^{-2}$, см. по поводу этого ограничения 11.63.

11.67. Наиболее существенный, экспоненциальный множитель в искомой вероятности определяется проникаемостью электростатического барьера $V = -e\mathcal{E}z$ и равен (ниже $e = \hbar = m = 1$)

$$w \sim \frac{v}{r_S} D \sim \frac{1}{r_S^2} \exp \left\{ -2 \int_0^b \sqrt{\kappa_0^2 - 2\mathcal{E}z} dz \right\} \approx \frac{1}{r_S^2} \exp \left\{ -\frac{2\kappa_0^3}{3\mathcal{E}} \right\}. \quad (1)$$

Здесь $b = \kappa_0^2/2\mathcal{E}$ — правая точка поворота, левая точка поворота $a \sim r_S$, где r_S — радиус потенциала и положено $\kappa_0 r_S \ll 1$ (слабовязанная частица, ее энергия $E_0 = -\kappa_0^2/2$) и, наконец, v/r_S — число ударов о барьер в единицу времени; сравнить с 9.30 и 9.28.

Для уточнения этого результата заметим, что использованное в выражении (1) значение проникаемости барьера отвечает частице, движущейся строго вдоль поля (в направлении оси z). Для частицы, движущейся под углом θ к полю, барьер менее прозрачен и это обстоятельство качественно можно учесть, считая, что эффективное электрическое поле для нее есть $\mathcal{E} \cos \theta \approx \mathcal{E} (1 - \theta^2/2)$. При этом для вероятности туннельной ионизации частицы из состояния с орбитальным моментом l и его проекцией m на направление поля получаем ⁴⁴⁾

$$\begin{aligned} w_{lm} &\sim \frac{1}{r_S^2} \int |Y_{lm}(\eta)|^2 D(\mathcal{E} \cos \theta) d\Omega \approx \\ &\approx \frac{1}{r_S^2} \int |Y_{lm}|^2 \exp \left\{ -\frac{2\kappa_0^3}{3\mathcal{E}} \left(1 + \frac{\theta^2}{2} \right) \right\} d\Omega \approx \\ &\approx \frac{2l+1}{|m|! r_S^2} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \left(\frac{3\mathcal{E}}{4\kappa_0^3} \right)^{|m|+1} \exp \left(-\frac{2\kappa_0^3}{3\mathcal{E}} \right) \quad (2) \end{aligned}$$

(так как существенны лишь малые углы $\theta \ll 1$, то в шаровой функции достаточно ограничиться лишь $\propto \theta^{|m|}$ сомножителем) Для короткодействующего потенциала эта формула правильно передает зависимость вероятности ионизации от напряженности слабого электрического поля как в экспоненциальном, так и в предэкспоненциальном сомножителях.

⁴⁴⁾ Строго говоря, в выражение (2) следовало бы также ввести множитель $\sim (\kappa_0 r_S)^{2l+1}$, учитывающий уменьшение вероятности вылета частицы из-за центробежного барьера, сравнить с 9.30.

11.68. Гамильтониан системы «ядро + электрон» имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{яд}} - \frac{1}{2} \Delta_e - \sum_p \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|}. \quad (1)$$

Здесь $\hat{H}_{\text{яд}}$ — гамильтониан ядерной подсистемы в с.ц.и. ядра (и всей системы в целом), суммирование проводится по всем протонам ядра. Записав

$$U = - \sum_p \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} = - \frac{Z}{r_e} - \sum_p \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} - \frac{1}{r_e} \right) \equiv - \frac{Z}{r_e} + V$$

(начало координат выбрано в центре масс), замечаем, что V представляет часть взаимодействия, зависящую от состояния ядерной подсистемы и ответственную за рассматриваемый переход (в приближении точечного ядра $V \equiv 0$). Его вероятность (в единицу времени) рассчитывается по формуле

$$d\omega_{\nu} = 2\pi |V_{\nu n}|^2 \delta(E_{\nu} - E_n^{(0)}) d\nu. \quad (2)$$

Волновые функции, входящие в матричный элемент возмущения $V_{\nu n}$, имеют вид

$$\Psi_n^{(0)} = \Psi_0^{\text{яд}} \cdot \Psi_0, \quad \Psi_0 = \left(\frac{Z^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-Zr_e},$$

$$\Psi_{\nu}^{(0)} \approx \Psi_1^{\text{яд}} \cdot \Psi_{\mathbf{k}}, \quad \Psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_e},$$

где $\Psi_0^{(1)}$ — в. ф. ядерной подсистемы, так что

$$V_{\nu n} = - \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{8} \pi^2} \iint \Psi_1^{\text{яд}*} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_e} \sum_p \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} - \frac{1}{r_e} \right) \times \\ \times e^{-Zr_e} \Psi_0^{\text{яд}} d\tau dV_e.$$

Здесь $d\tau$ — произведение дифференциалов всех независимых координат ядра (включая и спиновые переменные).

Для вычисления матричного элемента воспользуемся разложением кулоновского потенциала в интеграл Фурье:

$$\sum_p \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d^3q}{q^2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_e} \sum_p e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_p},$$

при этом

$$V_{vn} = - \frac{Z^{3/2}}{2^{5/2}\pi^4} \int \frac{d^3q}{q^2} \int d\tau \Psi_1^{\text{яд}*} \sum_p (e^{iqr_p} - 1) \Psi_0^{\text{яд}} \times \\ \times \int dV_e e^{i(q-k)r_e - Zr_e}. \quad (3)$$

Здесь можно разложить «ядерную» экспоненту в ряд по степеням qr_p . Это соответствует разложению слагаемых $|r_e - r_p|^{-1}$ по малому параметру $r_p/r_e \sim ZR_{\text{яд}}/a_B \ll 1$ (однако оно менее удобно для дальнейших преобразований, чем используемый прием с переходом к фурье-компонентам). Разложив экспоненту, получаем

$$\int \Psi_1^{\text{яд}*} \sum_p (e^{-iqr_p} - 1) \Psi_0^{\text{яд}} d\tau \approx \\ \approx \int \Psi_1^{\text{яд}*} \left(-iq \sum_p r_p \right) \Psi_0^{\text{яд}} d\tau \equiv -iqd_{10}, \quad (4)$$

где d_{10} обозначает матричный элемент дипольного момента ядра. Далее, проинтегрировав по координатам электрона, что дает

$$\int \exp [i(q-k)r_e - Zr_e] dV_e = \frac{8\pi Z}{[Z^2 + (q-k)^2]^2},$$

приводим матричный элемент (3) к виду

$$V_{vn} = \frac{i\sqrt{2} Z^{5/2}}{\pi^3} d_{10} \int \frac{d^3q}{q^2} \frac{q}{[Z^2 + (q-k)^2]^2}. \quad (5)$$

Так как скорость вылетающего электрона много больше атомной⁴⁵⁾, т. е. $k \gg Z$ (при этом энергия вылетающего электрона $E_k = k^2/2 \approx E_{\text{яд},0} - E_{\text{яд},1}$), то в интеграле (5) доминирующую роль играет область значений q , для которых $|q-k| \ll Z$, и поэтому

$$\int \frac{d^3q}{q^2} \frac{q}{[Z^2 + (q-k)^2]^2} \approx \frac{k}{k^2} \int \frac{d^3q}{[Z^2 + (q-k)^2]^2} = \frac{\pi^2}{Z} \frac{k}{k^2}$$

($q \approx k$, отсюда, кстати, следует неравенство $qr_{\text{яд}} \ll 1$, непосредственно подтверждающее возможность использованного выше разложения экспоненты). Таким образом,

$$V_{vn} = \frac{i\sqrt{2} Z^{3/2}}{\pi k^2} kd_{10}. \quad (6)$$

⁴⁵⁾ Именно в этом случае в качестве волновой функции вылетающего электрона можно выбрать плоскую волну (в.ф. свободного электрона).

Так как в формуле (2) $dv \equiv k^2 dk d\Omega = k dE_k d\Omega$, то, выполняя в ней с учетом (6) интегрирование сначала по E_k , а затем и по углам вылета электрона, находим

$$d\omega = \frac{4Z^3}{\pi} \frac{|k\mathbf{d}_{10}|^2}{k^3} d\Omega, \quad \omega = \frac{16Z^3}{3k} |\mathbf{d}_{10}|^2. \quad (7)$$

Так как в атоме имеется два K -электрона, то полная вероятность внутренней конверсии (в единицу времени) на электронах K -оболочки равна

$$\omega_K = 2\omega = \frac{32Z^3}{3k} |\mathbf{d}_{10}|^2 = \frac{32m^3e^6}{3\hbar^7} \frac{Z^3e^2}{\hbar\nu} |\mathbf{d}_{10}|^2 \quad (8)$$

(в последнем выражении мы перешли к обычной системе единиц).

С другой стороны, вероятность дипольного излучения фотона при ядерном переходе

$$\omega_{\text{изл}} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{10}|^2,$$

см. (XIV. 10), $\hbar\omega = mv^2/2$, так что коэффициент внутренней конверсии

$$\beta_K \equiv \frac{\omega_K}{\omega_{\text{изл}}} = \frac{Z^3\alpha^4}{2} \left(\frac{2mc^2}{\hbar\omega} \right)^{7/2}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}. \quad (9)$$

Как видно, он резко возрастает с увеличением Z и с уменьшением частоты ω .

11.69. Задача решается аналогично предыдущей, причем начальная стадия решения обеих задач одинакова. Однако теперь при вычислении ядерной части матричного элемента уже нельзя воспользоваться формулой (4), так как в условиях данной задачи $\mathbf{d}_{10} = 0$. Беря следующий член разложения экспоненты по степеням $q\mathbf{r}_p$, получаем ядерную часть матричного элемента в виде

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \int \Psi_1^{\text{яд}} * \sum_p (q\mathbf{r}_p) (q\mathbf{r}_p) \Psi_0^{\text{яд}} d\tau = \\ & = -\frac{q_i q_k}{2} \int \Psi_1^{\text{яд}} * \sum_p x_{pi} x_{pk} \Psi_0^{\text{яд}} d\tau \equiv -\frac{1}{6} q_i q_k Q_0 \delta_{ik} = \\ & = -\frac{1}{6} q^2 Q_0, \quad (1) \end{aligned}$$

где

$$Q_0 = \int \Psi_1^{\text{яд}} * \left(\sum_p r_p^2 \right) \Psi_0^{\text{яд}} d\tau \quad (2)$$

(при этом предполагается, что четности начального и конечного состояний ядра одинаковые, в противном случае $Q_0 = 0$).

Соответственно матричный элемент возмущения равен

$$V_{vn} = \frac{1}{12\pi^2} Q_0 \iint e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_e} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_e) \Psi_0(r_e) d^3q dV_e,$$

и после интегрирования по \mathbf{q} , приводящего к δ -функции $\delta(\mathbf{r}_e)$, получаем

$$V_{vn} = \frac{2\pi}{3} Q_0 \Psi_{\mathbf{k}}^*(0) \Psi_0(0). \quad (3)$$

Теперь легко находим угловое распределение вылетающего электрона и полную вероятность его вылета (в единицу времени)

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{d\Omega} &= \frac{8\pi^3}{9} k |Q_0|^2 |\Psi_{\mathbf{k}}^*(0) \Psi_0(0)|^2, \\ \omega &= \frac{32\pi^4}{9} k |Q_0|^2 |\Psi_{\mathbf{k}}^*(0) \Psi_0(0)|^2 \end{aligned} \quad (4)$$

(изотропный характер распределения $d\omega/d\Omega$ очевиден заранее из соображений симметрии).

С учетом наличия в атоме двух K -электронов вероятность рассматриваемого $E0$ -перехода равна $\omega_{E0} = 2\omega$. В частности, если вылетающий электрон является быстрым, $k \gg Z$, то $\Psi_{\mathbf{k}}(0) \approx (\approx (2\pi)^{-3/2})$, и соответственно

$$\omega_{E0} = \frac{8}{9} Z^3 k |Q_0|^2. \quad (5)$$

В заключение отметим, что из полученных формул видно, что доминирующую роль внутренняя конверсия играет именно на электронах K -оболочки (так как $\omega \propto |\Psi(0)|^2$, сравнить с 14.18 и 14.19).

11.70. Гамильтониан системы, состоящей из мюона и электрона (представляющего один из электронов K -оболочки), находящихся в кулоновском поле ядра с зарядом Z , имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m_{\mu}} \Delta_{\mu} - \frac{Z}{r_{\mu}} - \frac{1}{2} \Delta_e - \frac{Z}{r_e} + \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_{\mu}|}. \quad (1)$$

Так как размер мюонной орбиты много меньше электронной ($m_{\mu} = 207m_e$, а радиус Бора $a_B \propto m^{-1}$), то этот гамильтониан естественно записать в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mu} + \hat{H}_e + \hat{V},$$

где

$$\hat{H}_{\mu} = -\frac{1}{2m_{\mu}} \Delta_{\mu} - \frac{Z}{r_{\mu}}, \quad \hat{H}_e = -\frac{1}{2} \Delta_e - \frac{Z-1}{r_e}$$

$$\hat{V} = \frac{1}{|r_e - r_\mu|} - \frac{1}{r_e}.$$

В пренебрежении возмущением \hat{V} рассматриваемая система представляет две независимые подсистемы: мюонную и электронную (с экранированным на 1 зарядом ядра).

Легко заметить, что расчет эффекта Оже совершенно аналогичен расчету вероятности внутренней конверсии, см. 11.68, так как формально можно рассматривать мюонную подсистему как ядро. Более того, формулы, описывающие дипольный (или P -) эффект Оже, получаются из формул задачи 11.68 заменой в них Z на $Z - 1$ и подстановкой мюонных в.ф. начального и конечного состояний вместо ядерных в.ф. $\Psi_{0,1}^{\text{яд}}$. Вероятность его (в единицу времени) с учетом наличия двух K -электронов имеет вид

$$\omega_P = \frac{32}{3} \frac{(Z-1)^3 e^2}{\hbar v} \frac{m_e^3 e^6}{\hbar^7} |d_{10}|^2 \quad (2)$$

(сравнить с формулой (8) из 11.68), где v — скорость вылетающего электрона, d_{10} — матричный элемент дипольного момента мюона. В частности, для мюонного перехода $2p \rightarrow 1s$ имеем

$$|d_{10}|^2 = 2^{15} / (3^{10} Z^2 m_\mu^2), \quad v^2 = 3Z^2 m_\mu / 4$$

в атомных единицах, $m_\mu = 207$) и согласно (2) получаем

$$\omega_P (2p \rightarrow 1s) \approx 4,6 \cdot 10^{11} (Z-1)^3 / Z^3 \text{ с}^{-1},$$

сравнить с вероятностью излучения фотона $\omega_{\text{изл}} \approx 1,3 \cdot 10^{11} Z^4 \text{ с}^{-1}$.

В заключение отметим, что так как размер мюонной орбиты $a_{n,\mu} \sim n^2 / Z m_\mu$, а размер орбиты K -электрона $\sim 1/Z$, то условие применимости формулы (2) является неравенство $n^2 \ll m_\mu \approx 200$ (при этом вылетающий электрон является быстрым).

11.71. Если дипольный переход Оже аналогичен процессу внутренней конверсии при дипольном переходе ядра, см. 11.68, то S -переход Оже в случае, когда мюон имеет орбитальный момент $l = 0$ и в начальном и в конечном состояниях, является аналогом конверсии при $E0$ -переходе в ядре, см. 11.69. Точно так же, как решение предыдущей задачи дублировало решение 11.68, решение данной задачи дублирует 11.69.

Вероятность расщепляемого перехода (с учетом наличия двух K -электронов) описывается выражениями

$$w_S(n_1s \rightarrow n_2s) = \frac{8}{9} (Z-1)^3 k |Q_0|^2, \quad (1)$$

$$Q_0 = \int \Psi_{n_2,00}^*(r_\mu) r_\mu^2 \Psi_{n_1,00}(r_\mu) d^3r_\mu,$$

сравнить с формулами (5) и (2) из 11.69.

В частности, используя явные выражения для в. ф. $\Psi_{n,00}$ водородоподобного мезоатома, находим для мюонного перехода $2s \rightarrow 1s$ значение $Q_0^2 = 2^{19} / (3^{10} Z^4 m_\mu^4)$, и так как при этом $k^2 = 3Z^2 m_\mu / 4$, то согласно (1) получаем

$$w_S(2s \rightarrow 1s) = \frac{2^{21}}{\sqrt{3} 3^{11}} \frac{(Z-1)^3}{m_\mu^{7/2} Z^3} \text{ а. е.} \approx 2,21 \left(\frac{Z-1}{Z} \right)^3 10^9 \text{ с}^{-1}.$$

11.72. Существует 4 (с учетом спина 8) независимых одночастичных состояний с главным квантовым числом $n=2$: одно $2s$ -состояние и три $2p$ -состояния (с $l_z = 0$ и ± 1). Для электронной конфигурации $2s^2$ имеем, очевидно, $L=0$, $I=+1$, $S=0$; при этом в. ф. такого термина $^1S^+$ имеет вид

$$\Psi_{2s^2} = \psi_{2s}(r_1) \psi_{2s}(r_2) \chi_{\alpha\beta}^{(-)}, \quad (1)$$

где $\psi_{2s}(r) = \sqrt{Z^3/8\pi} (1 - Zr/2) e^{-Zr/2}$ — в. ф. $2s$ -состояния водородоподобного атома, а $\chi_{\alpha\beta}^{(-)}$ — антисимметричная спиновая в. ф., отвечающая значению $S=0$ (в силу принципа Паули состояния с $S=1$ для конфигурации $2s^2$ не существует).

Для конфигурации $2s2p$ имеем $L=1$, $I=-1$ и возможны как синглетные, $S=0$, так и триплетные, $S=1$, состояния. Координатные части волновых функций таких термов $^1,^3P^-$ имеют вид

$$\Psi_{2s2p} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{2s}(r_1) \psi_{2p}(r_2) \pm \psi_{2p}(r_1) \psi_{2s}(r_2) \}, \quad (2)$$

где $\psi_{2p}(\mathbf{r}) = \sqrt{Z^5/32\pi} (a\mathbf{r}) e^{-Zr/2}$ — в. ф. $2p$ -состояний, при этом $|a|=1$, см. 3.42, а знаки $+$ и $-$ относятся к значениям S , равным 0 и 1.

Наконец, с четной, $I=+1$, конфигурацией $2p^2$ связаны как синглетные $^1S^+$ - и $^1D^+$ -термы, так и триплетный $^3P^+$ -терм. Волновые функции этих термов определяются формулой (2) из 11.17, где под $\psi(r)$ следует понимать радиальную в. ф. $2p$ -состояния. В частности, для $^1S^+$ -терма имеем

$$\Psi_{2p^2, L=0} = \frac{\sqrt{3}}{96\pi} Z^5 (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) e^{-Z(r_1+r_2)/2} \chi_{\alpha\beta}^{(-)}. \quad (3)$$

В пренебрежении взаимодействием между электронами энергия всех указанных состояний одинакова и равна $E^{(0)} = -2(Z^2/2n^2) = -Z^2/4$. Она больше энергии основного состояния соответствующего одноэлектронного иона, равной $-Z^2/2$, что и указывает на неустойчивость таких состояний: в результате электрон-электронного взаимодействия возможен переход одного из электронов в $1s$ -состояние с одновременным вылетом другого, сравнить с 11.12.

Перейдем к расчету изменения энергии рассматриваемых состояний за счет взаимодействия электронов друг с другом. Начнем с $^1S^+$ -термов. Так как их два (для конфигураций $2s^2$ и $2p^2$), то следует воспользоваться секулярным уравнением. Вычисление матричных элементов дает

$$\begin{aligned} \langle 2s^2 | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 2s^2 \rangle &= \frac{77}{512} Z, & \langle 2p^2 | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 2p^2 \rangle &= \frac{111}{512} Z, \\ \langle 2s^2 | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 2p^2 \rangle &= \langle 2p^2 | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 2s^2 \rangle = -\frac{45}{512\sqrt{3}} Z \end{aligned} \quad (4)$$

(методы вычисления соответствующих интегралов описаны в задачах 11.5, 11.10 и 11.17). Теперь решение секулярного уравнения позволяет найти сдвиги $^1S^+$ -термов и правильные функции нулевого приближения:

$$E_{iS^+, 1(2)}^{(1)} = \frac{47 \mp \sqrt{241}}{256} Z = \begin{cases} 0,123Z = E_{iS^+, 1}^{(1)}, \\ 0,244Z = E_{iS^+, 2}^{(1)}, \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} |^1S^+, 1\rangle &= 0,880 \{ |2s^2\rangle + 0,540 |2p^2\rangle \}, \\ |^1S^+, 2\rangle &= 0,880 \{ -0,540 |2s^2\rangle + |2p^2\rangle \}. \end{aligned} \quad (6)$$

Как видно, в нижнем по энергии из расщепленных $^1S^+$ -термов с большей вероятностью представлена конфигурация $2s^2$, для нее $\omega_{2s^2, 1} \approx 0,774$, а в верхнем, наоборот, конфигурация $2p^2$. Соответственно эти термы иногда так и классифицируют как $2s^2 \ ^1S^+$ и $2p^2 \ ^1S^+$ (следует, однако, иметь в виду, что «смешивание» конфигураций (6) существеннейшим образом сказывается на значениях ширин этих автоионизационных состояний).

Сдвиги остальных термов определяются средним значением возмущения $V = \frac{1}{|r_1 - r_2|}$ в соответствующих состояниях и оказываются равными

$$\begin{aligned} E^{(1)}(^3P^+) &= \frac{21}{128} Z \approx 0,164Z, & E^{(1)}(^1D^+) &= \frac{237}{1280} Z \approx 0,185Z, \\ E^{(1)}(^{1(3)}P^-) &= \frac{83 \pm 15}{512} Z \approx \begin{cases} 0,191Z, & ^1P^-, \\ 0,133Z. & ^3P^-, \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

Отметим, что сдвиги термов для конфигурации $2p^2$ легко вычислить по формуле (7) из 11.17.

Из выражений (5) и (7) видно, что наименьшую энергию имеет один из термов 1S (у другого из них, наоборот, энергия максимальна). Для этого АИС энергия вылетающего электрона равна $Z^2/4 + 0,123Z$, что для атома гелия составляет 33,9 эВ; энергия же возбуждения этого состояния из основного состояния атома ($E_0(\text{He}) = -79,0$ эВ) равна 58,5 эВ (хотя $Z = 2$ невелико, тем не менее приведенные значения отличаются от точных лишь на 0,5 эВ, для других термов отличие не превышает 2 эВ).

Перейдем к вопросу о ширинах рассматриваемых АИС. Их значения в первом приближении по возмущению $V = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}$ могут быть найдены по обычной формуле для вероятности перехода в единицу времени ($\Gamma_i = \omega_{i \rightarrow f}$, $\hbar = 1$):

$$\omega_{i \rightarrow f} = 2\pi \int |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) dv_f. \quad (8)$$

Для описания конечных состояний $|f\rangle$ в качестве набора квантовых чисел вылетающего электрона удобно выбрать k, l, m ; $E_k = k^2/2$. Так как при этом другой электрон переходит в $1s$ -состояние, а суммарный спин при ионизации не изменяется, $S_f = S_i$, то координатная часть в. ф. Ψ_f получается в результате соответствующей симметризации (или антисимметризации) функции

$$Y_{lm}(\mathbf{n}_1) R_{kl}(r_1, Z) \Psi_{1s}(r_2), \quad (9)$$

где R_{kl} является радиальной в. ф. электрона в кулоновском потенциале

$$R_{kl} = \frac{2k |\Gamma(l+1 - iZ/k)|}{\sqrt{2\pi} (2l+1)!} (2kr)^l e^{-ikr + \pi Z/2k} \times \\ \times F\left(\frac{iZ}{k} + l + 1, 2l + 2, 2ikr\right).$$

Здесь, по сравнению с [1, § 36], произведена модификация, учитывающая вид потенциала $-Z/r$ (а не $-1/r$, как в [1]), и введен дополнительный множитель $(2\pi)^{-1/2}$, соответствующий нормировке в. ф. $\Psi_{klm} = Y_{lm}R_{kl}$ вида

$$\langle klm | k'l'm' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(k - k').$$

При такой нормировке интегрирование $\int dv_f \dots$ в формуле (8)

сводится к $\sum_{lm} \int dk \dots$ и она принимает вид

$$\omega_{i \rightarrow f} = \frac{2 \cdot 2\pi}{k} \sum_m |\langle k, l_f, m; 1s | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | \Psi_i \rangle|^2 \quad (10)$$

(момент вылетающего электрона l_f совпадает с орбитальным моментом L рассматриваемого состояния). Здесь в.ф. конечного состояния совпадает с (9), т. е. не является симметризованной; поэтому в формулу (10) введен дополнительный множитель, равный 2 (при этом существенно, что в.ф. начальных состояний, указанные выше, должным образом симметризованы!).

Вычисление радиальной части матричного элемента возмущения в формуле (10) требует численных расчетов (интегрирование же по углам проводится обычным образом, например, как в 11.17). Поэтому ограничимся рядом общих замечаний в отношении ширин рассматриваемых автоионизационных состояний.

1) Если для k воспользоваться невозмущенным значением, $k^2/2 = E_i^{(0)} - E_{1s}$, т. е. $k = Z/\sqrt{2}$, то легко заметить, что значение ширины $\Gamma_i = \omega_{i \rightarrow f}$ согласно (10) оказывается не зависящим от заряда ядра Z .

2) Числовые значения ширины существенно различны для разных АИС. Наибольшую ширину, $\Gamma \sim 0,2$ эВ, имеют нижний $^1S^+$, а также $^1D^+$ и $^1P^-$ -термы (то, что величина ширины на два порядка меньше характерного значения $me^4/\hbar^2 \approx 27$ эВ, можно понять, если заметить, что согласно (6), (7) матричный элемент возмущения имеет малость $\sim 0,1 \div 0,2$). Для состояния $^3P^-$ и второго термина $^1S^+$ ширины существенно (более чем на порядок) меньше. Это связано с заметной компенсацией в матричном элементе вкладов различных слагаемых, представляющих в случае $^3P^-$ -состояния «прямое» и «обменное» взаимодействия, а в случае $^1S^+$ -терма — вклады от $2s^2$ - и $2p^2$ -конфигураций, см. (6).

3) Вычисление ширины в первом порядке теории возмущений при небольших значениях Z не обеспечивает достаточно хорошей точности (результаты носят скорее качественный характер). Это связано, в основном, с эффектом экранировки заряда ядра для вылетающего электрона, оказываемой $1s$ -электроном.

4) Отметим, наконец, интересное обстоятельство, связанное с состоянием $^3P^+$ (для конфигурации $2p^2$), имеющим орбитальный момент $L = 1$, положительную четность и электронный спин $S = 1$. Распад такого состояния с переходом одного из электронов в $1s$ -состояние и вылетом другого запрещен законами сохранения момента и четности. Действительно, вылетающий

электрон должен иметь орбитальный момент $l_f = 1$, но при этом четность конечного состояния оказывается отрицательной. Это означает, что при учете лишь кулоновского взаимодействия такое состояние, находящееся непосредственно на фоне непрерывного спектра, остается истинно связанным состоянием. Релятивистские поправки к взаимодействию (их часть, описывающая взаимодействие спина и орбиты) приводят к появлению у этого состояния ионизационной ширины.

11.73. Гамильтониан спиновой подсистемы для основного состояния мюония, находящегося в магнитном поле (направленном вдоль оси z), имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\Delta}{4} \hat{\sigma}^\mu \hat{\sigma}^{(e)} + \frac{e\hbar}{2m_e c} \mathcal{H} \hat{\sigma}_z^{(e)}. \quad (1)$$

Первое слагаемое здесь описывает взаимодействие спиновых магнитных моментов мюона и электрона и определяется формулами (2) и (4) задачи 11.2; при этом

$$\Delta = \frac{32\pi}{3} \mu_B^{(e)} \mu_B^{(\mu)} \Psi_{1s}^2(0)$$

является сверхтонким расщеплением основного, $1s$ -уровня мюония. Во втором слагаемом в (1) пренебрежено взаимодействием с \mathcal{H} магнитного момента мюона ввиду малости (в 207 раз) соответствующего магнетона Бора по сравнению с электронным $\mu_B^{(e)}$.

Учитывая сохранение S_z и рассматривая взаимодействие с магнитным полем как возмущение ($\mu_B^{(e)} \mathcal{H} \ll \Delta$), замечаем, что спиновые функции χ_{SS_z} электрон-мюонной системы, отвечающие состояниям с определенными значениями суммарного спина S и его проекции S_z (см. 5.10), являются правильными функциями нулевого приближения для гамильтониана (1). Соответствующие с. з. E_{SS_z} определяются формулами (VIII. 1) теории возмущений первого и второго приближений (см. также 11.42):

$$E_{1, \pm 1} = \frac{\Delta}{4} \pm \mu_B^{(e)} \mathcal{H}, \quad E_{10} \approx \frac{\Delta}{4} + \frac{(\mu_B^{(e)} \mathcal{H})^2}{\Delta},$$

$$E_{00} \approx -\frac{3\Delta}{4} - \frac{(\mu_B^{(e)} \mathcal{H})^2}{\Delta}. \quad (2)$$

Для временной зависимости спиновой волновой функции системы согласно формуле (VI. 2) имеем⁴⁶⁾ ($n \equiv S, S_z$):

$$\Psi(t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \chi_{SS_z}. \quad (3)$$

⁴⁶⁾ Сначала рассмотрим *чистое* спиновое состояние системы, а затем перейдем к описанию с помощью матрицы плотности.

Коэффициенты c_n в этом разложении определяются начальными условиями. Так как при $t=0$ мюон поляризован в направлении, перпендикулярном магнитному полю, то, выбирая это направление за ось x , имеем (см. 5.1):

$$\Psi(0) \propto \chi_{s_x=1/2}^{(\mu)}, \text{ так что } \Psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}_\mu \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}_e. \quad (4)$$

Используя явный вид спиновых функций χ_{SS_z} :

$$\chi_{1(0),0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_\mu \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_e \pm \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_\mu \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_e \right\};$$

$$\chi_{11} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_\mu \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_e; \quad \chi_{1,-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_\mu \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_e,$$

из условия совпадения в.ф. (3) при $t=0$ с функцией (4) находим

$$c_{10} + c_{00} = \sqrt{2} c_{1,-1} = a_1, \quad c_{10} - c_{00} = \sqrt{2} c_{11} = a_2. \quad (5)$$

Отсюда

$$c_{1(0),0} = (a_1 \pm a_2)/2.$$

Задание (комплексных) величин a_i однозначно определяет спиновую функцию системы $\Psi(t)$. Соответственно именно через них — в виде билинейной комбинации по $a_k^* a_i$ — выражается в произвольный момент времени любая спиновая характеристика электро-мюонной системы. Как видно из выражения (4), эти величины a_i определяют спиновую функцию электрона в момент времени $t=0$. Если же начальное состояние электрона задано матрицей плотности $\hat{\rho}$ (см. (V.5)), то в соответствующих билинейных комбинациях следует сделать подстановку

$$a_i a_k^* \rightarrow \overline{a_i a_k^*} = \rho_{ik},$$

причем для полностью неполяризованного состояния (как в условиях задачи)

$$\overline{a_1 a_1^*} = \overline{a_2 a_2^*} = \frac{1}{2}, \quad \overline{a_1 a_2^*} = 0. \quad (6)$$

Для вычисления вектора поляризации мюона

$$\mathbf{P}^{(\mu)}(t) = \langle \Psi(t) | \hat{\sigma}^{(\mu)} | \Psi(t) \rangle$$

предварительно удобно рассмотреть действие операторов $\hat{\sigma}_z^{(\mu)}$ и $\hat{\sigma}_x^{(\mu)} + i\hat{\sigma}_y^{(\mu)}$ на спиновые функции χ_{SS_z} . При этом

$$\hat{\sigma}_z^{(\mu)} |1(0), 0\rangle = |0(1), 0\rangle, \quad \hat{\sigma}_z^{(\mu)} |1, \pm 1\rangle = \pm |1, \pm 1\rangle;$$

$$(\hat{\sigma}_x^{(\mu)} + i\hat{\sigma}_y^{(\mu)}) |1(0), 0\rangle = \pm \sqrt{2} |1, 1\rangle, \quad (\hat{\sigma}_x^{(\mu)} + i\hat{\sigma}_y^{(\mu)}) |1, 1\rangle = 0,$$

$$(\hat{\sigma}_x^{(\mu)} + i\hat{\sigma}_y^{(\mu)}) |1, -1\rangle = \sqrt{2} (|1, 0\rangle + |0, 0\rangle).$$

Теперь нетрудно найти

$$P_x^{(\mu)}(t) + iP_y^{(\mu)}(t) = \frac{1}{4} \sum_k e^{i\omega_k t}, \quad P_z^{(\mu)}(t) = 0, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \hbar\omega_1 &= E_{11} - E_{10} = \mu_B^{(e)} \mathcal{H} - \frac{(\mu_B^{(e)} \mathcal{H})^2}{\Delta}, \\ \hbar\omega_2 &= E_{10} - E_{1,-1} = \mu_B^{(e)} \mathcal{H} + \frac{(\mu_B^{(e)} \mathcal{H})^2}{\Delta}, \\ \hbar\omega_3 &= E_{00} - E_{1,-1} = \hbar\omega_1 - \Delta, \quad \hbar\omega_4 = E_{11} - E_{00} = \hbar\omega_2 + \Delta. \end{aligned} \quad (8)$$

Обсудим полученные результаты.

1) При $t = 0$ имеем $P(0) = 1$ — полностью поляризованный (вдоль оси x) мюон в соответствии с условием задачи. Однако в последующие моменты времени уже $P(t) < 1$, так что возникает *деполяризация*.

2) Зависимость $P_x + iP_y \propto e^{i\omega t}$ описывает равномерную прецессию с частотой ω вектора поляризации $\mathbf{P}(t)$ вокруг оси z . Согласно (7) полученную временную зависимость $\mathbf{P}(t)$ наглядно можно охарактеризовать как четырехчастотную прецессию.

3) Частоты прецессии ω_k имеют существенно различный порядок величины. Две из них: ω_3 и ω_4 велики, для них

$$|\omega|/2\pi \approx \Delta/2\pi\hbar \equiv \nu_0 \approx 4,5 \cdot 10^3 \text{ МГц}$$

(сравнить с 1420 МГц для водорода, см. 11.2). Частоты $\omega_{1,2}$, ввиду условия $\mu_B^{(e)} \mathcal{H} \ll \Delta$, имеют значительно меньшую величину. Если усреднить вектор $\mathbf{P}(t)$ по периоду быстрых осцилляций, $T = \nu_0^{-1} \sim 10^{-10}$ с (это время существенно меньше времени жизни мюона), то выражение (7) принимает вид

$$\langle P_x + iP_y \rangle = \frac{1}{4} (e^{i\omega_1 t} + e^{i\omega_2 t}) = \frac{1}{2} e^{i\omega_H t} \cos\left(\frac{\hbar\omega_H^2}{\Delta} t\right) \quad (9)$$

(уже двухчастотная процессия), где $\omega_H = \mu_B^{(e)} \mathcal{H}/\hbar$. Заметим, что в отсутствие магнитного поля $\omega_1 = \omega_2 = 0$, так что $\langle \mathbf{P}(t) \rangle = (1/2, 0, 0)$, т. е. степень деполяризации мюона вообще не зависит от сверхтонкого расщепления Δ (именно поэтому интересна динамика мюонного спина при наличии магнитного поля).

11.74. Формула теории возмущений по длине рассеяния для сдвига уровня, см., например, (5) из 11.4, остается справедливой и при наличии в системе *поглощения* на малых расстояниях. Такое поглощение, соответствующее неупругому взаимодействию,

возникает за счет связи различных каналов⁴⁷⁾, которые в отсутствие короткодействующего взаимодействия выступают как независимые системы: dt и $p\alpha$ в условиях данной задачи. При этом длина рассеяния является комплексной величиной. Изменение энергии системы под влиянием короткодействующего взаимодействия также становится комплексным, а мнимая часть его, $\Delta E = \Delta E_r - i\Gamma/2$, описывает ширину s -уровня

$$\Gamma = - \frac{4\pi\hbar^2}{m} |\Psi^{(0)}(0)|^2 \text{Im } a_s, \quad (1)$$

определяющую время жизни рассматриваемого состояния $\tau = \hbar/\Gamma$ и скорость протекания реакции $\lambda_f = \tau^{-1} = \Gamma/\hbar$.

Для мезомолекулярного иона под волновой функцией $\Psi^{(0)}(r_{dt})$ в выражении (1) следует понимать в.ф. ядерной подсистемы в адиабатическом приближении для s -состояния (так как вращательное квантовое число $K=0$). График эффективного потенциала для этой подсистемы без его короткодействующей ядерной части приведен на рис. 41.

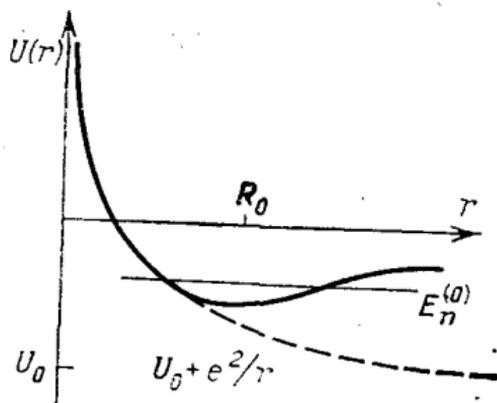


Рис. 41

Для оценки величины $|\Psi^{(0)}(0)|^2$ прежде всего заметим, что характерные значения $|\Psi^{(0)}(r)|^2$ в существенной области локализации ядер в ионе порядка

$$|\Psi_{\text{хар}}|^2 \sim \frac{3}{4\pi R_0^3}, \quad (2a)$$

где $R_0 = 2L_\mu$ — характерный размер иона, см. 11.30; $L_\mu = \hbar^2/m_\mu e^2$ и m_μ — масса мюона. В связи с этой оценкой заметим, что в адиабатическом приближении более естественной является оценка

$$|\Psi_{\text{хар}}|^2 \sim \frac{1}{4\pi R_0^2 \cdot 2a_{\text{кол}}}, \quad (2b)$$

соответствующая области локализации волновой функции в сферическом слое радиуса R_0 и шириной порядка удвоенной амплитуды колебаний ядер в ионе. Так как $a_{\text{кол}} \sim (m_\mu/M_{\text{яд}})^{1/4} L_\mu$

⁴⁷⁾ Включая каналы с непрерывным спектром при рассматриваемой энергии ($p\alpha$ -канал в данной задаче).

(сравнить с 11.25 и 11.30), то обе указанные оценки приводят к одинаковым значениям.

Однако величина $|\Psi^{(0)}(0)|^2$ существенно меньше, что связано с наличием малопроницаемого кулоновского барьера, разделяющего «молекулярную» область движения ядер и ядерную область, где протекает реакция синтеза $dt \rightarrow \alpha$. С учетом этого обстоятельства для $|\Psi^{(0)}(0)|^2$ имеем следующую оценку:

$$|\Psi^{(0)}(0)|^2 \sim P(k) |\Psi_{\text{хар}}|^2 \approx \frac{3}{16ka_B L_\mu^3} e^{-2\pi/ka_B}. \quad (3)$$

Здесь $a_B = \hbar^2/me^2$, m — приведенная масса ядер, как и в (1), $E = \hbar^2 k^2/2m$ — энергия относительного движения dt -системы на ядерных расстояниях. Множитель

$$P(k) = \frac{2\pi}{ka_B} \frac{1}{\exp(2\pi/ka_B) - 1}$$

характеризует отношение квадратов волновых функций частицы при $r \rightarrow 0$ в кулоновском потенциале отталкивания, $U = e^2/r$, и свободной, сравнить с [1, § 143] (при этом наиболее существенный при $ka_B < 1$ экспоненциальный сомножитель $\exp(-2\pi/ka_B)$ может быть рассчитан согласно квазиклассической формуле (IX.7), см. 9.31).

Важным в рассматриваемой задаче является числовое значение энергии E в выражении для $P(k)$. Оно определяется из следующих соображений. Эффективный потенциал dt -системы в адиабатическом приближении, см. рис. 41, вне ядерной области имеет вид $U = e^2/r + E_\mu(r)$, где $E_\mu(r)$ — энергия основного мюонного термина при «закрепленных» на расстоянии r ядрах. При $r \rightarrow 0$ (в существенной области кулоновского барьера) имеем

$$E_\mu(r) \approx -\mu (2e^2)^2/2\hbar^2 \equiv U_0,$$

где $\mu = m_\mu M/(m_\mu + M)$, $M = m_d + m_t$. Это следует из того, что при $r \ll L_\mu$ молекулярный терм $E_\mu(r)$ совпадает с основным уровнем уже μ -мезоатома с ядром, имеющим заряд $Z = 2$ и массу M . Если обозначить через $E_{0\nu}^{(0)}$ мезомолекулярные уровни (с $K = 0$) в эффективном потенциале, то, очевидно, искомое значение энергии $E = E_{0\nu}^{(0)} - U_0$. Обычно мезомолекулярные уровни характеризуют энергией связи $e_{0\nu}^{(0)}$, которая отсчитывается от основного уровня мезоатома с более тяжелым из ядер иона (определяющего нижнюю границу непрерывного спектра энергии системы при разведенных ядрах). При этом

$$E_{0\nu}^{(0)} = -\bar{\mu}e^4/2\hbar^2 - e_{0\nu}^{(0)},$$

где $\bar{\mu} = m_{\mu} m_t / (m_{\mu} + m_t)$, так что

$$E = \frac{2\mu e^4}{\hbar^2} - \frac{\bar{\mu} e^4}{2\hbar^2} - \varepsilon_{0\sigma}^{(0)}$$

или $E \approx 8,3$ кэВ $- \varepsilon_{0\sigma}^{(0)}$.

Воспользовавшись для dt -системы значениями $a_B = 24,0$ Фм, $\hbar^2/m\alpha_B^2 = 60,0$ кэВ, $L_{\mu} = 2,56 \cdot 10^{-11}$ см и положив $E = 8$ кэВ, так что $ka_B = 0,52$ (об энергии связи молекулярных уровней см. 11.30), по формулам (1) и (3) находим

$$\begin{aligned} \Gamma &\sim 1,5 \cdot 10^{-3} \text{ эВ,} \\ \tau &\sim 5 \cdot 10^{-13} \text{ с.} \end{aligned} \quad (4)$$

Сделаем несколько заключительных замечаний.

1) Время протекания ядерной реакции в мезомолекуле на 7 порядков меньше времени жизни мюона. Поэтому оно не играет заметной роли в кинетике μ -катализа и не сказывается на числе актов реакций синтеза⁴⁸), инициируемых одним мюоном, сравнить с 11.59.

2) Обращает на себя внимание большое значение длины рассеяния для dt -системы. Оно связано с существованием в системе квазистационарного состояния с малой энергией — ядра ${}^5\text{He}(3/2^+)$ (энергия резонанса $E_R \approx 50$ кэВ и ширина $\Gamma_R \approx 70$ кэВ; резонансные явления при рассеянии обсуждаются в задачах § 3 главы 13).

Приведенное выше значение τ относится именно к резонансному s -состоянию dt -системы с суммарным спином $I = 3/2$. Для нерезонансного состояния с $I = 1/2$ оценка τ (и Γ) отличается от (4), однако вывод о малости времени протекания реакции синтеза сохраняется и для этого состояния.

3) Как отмечалось в задачах 11.4, 9.3, при существовании в короткодействующем потенциале s -состояния с малой энергией происходит перестройка спектра s -уровней в далекодействующем потенциале. Однако перестройки мезомолекулярных уровней под влиянием ядерного резонансного взаимодействия не происходит. Это связано с малой проницаемостью кулоновского барьера, разделяющего молекулярную и ядерную области движения ядер в мезомолекуле. Аналогичная ситуация, из-за центробежного

⁴⁸) Заметим, что $ka_B \approx \sqrt{3m_{\mu}/m}$ и показатель экспоненты в проницаемости кулоновского барьера $\approx -12,5$. При переходе к обычным атомным системам (замене m_{μ} на m_e) величина показателя экспоненты сильно возрастает и время жизни молекулы оказывается столь большим, что протекание реакции синтеза становится ненаблюдаемым.

барьера, имеет место и для состояний с отличным от нуля орбитальным моментом (даже в отсутствие кулоновского барьера). При этом сдвиги уровней с $l \neq 0$ в условиях резонанса также малы, см. 13.36.

Г л а в а 12

АТОМНОЕ ЯДРО

12.1. Для частицы с массой μ в прямоугольной потенциальной яме радиуса R и глубины U_0 волновая функция s -состояния дискретного спектра энергий, $\Psi_E = \chi_E(r)/\sqrt{4\pi} r$, имеет вид

$$\chi_E = \begin{cases} A \sin(\sqrt{2\mu(U_0 - \epsilon_0)/\hbar^2} r), & r < R, \\ B e^{-\kappa r}, & r > R, \end{cases}$$

где $\epsilon_0 = |E| = \hbar^2 \kappa^2 / 2\mu$ — энергия связи. Условия непрерывности в. ф. и ее производной в точке $r = R$ приводят к уравнению для спектра

$$x \operatorname{ctg} x = -\kappa R, \quad x = \sqrt{2\mu(U_0 - \epsilon_0)R^2/\hbar^2}. \quad (1)$$

Применительно к дейтрону под μ следует понимать приведенную массу протон-нейтронной системы, $\mu \approx (m_p + m_n)/4$; при этом

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} = \frac{m_e}{m_p + m_n} \cdot \frac{2\hbar^2}{m_e a_B^2} \cdot a_B^2 \approx 4,15 \cdot 10^{-25} \text{ МэВ} \cdot \text{см}^2$$

и $\kappa R \approx 0,394$. Из уравнения (1) находим $x \approx 1,79$, и $U_0 = 48,1$ МэВ (этот наименьший положительный корень уравнения отвечает яме, в которой рассматриваемый уровень является основным и единственным дискретным уровнем вообще).

Поучительно также получить оценки с помощью общих формул для частицы с малой энергией в потенциальной яме с мелким уровнем. Для этого достаточно знать в. ф. лишь в момент возникновения связанного состояния. Для частицы в прямоугольной яме она имеет вид

$$\chi_{E=0}(r) = \begin{cases} C \sin \lambda r, & r < R, \\ 1, & r > R, \end{cases} \quad (2)$$

где $\lambda = \sqrt{2\mu\tilde{U}_0/\hbar^2}$, а \tilde{U}_0 — глубина ямы в момент возникновения s -уровня, сравнить с 4.25. Сшивание в. ф. при $r = R$ дает

$$\lambda R = (n + 1/2)\pi \quad \text{и} \quad C = (-1)^n,$$

причем $n = 0, 1, 2, \dots$ Для основного (первого по счету) уровня $\lambda R = \pi/2$. Отсюда применительно к рассматриваемой протон-нейтронной системе имеем

$$\tilde{U}_0 = \pi^2 \hbar^2 / 8\mu R^2 = 35,4 \text{ МэВ}$$

($R = 1,7 \cdot 10^{-13}$ см). При этом для дейтрона $\epsilon_0 \ll \tilde{U}_0$, так что он действительно является слабосвязанной системой. Чтобы уровень $E = 0$ опустился до значения $E_0 = -\epsilon_0$, яма должна быть углублена на δU_0 . Согласно результату 4.27 находим

$$\delta U_0 \approx \sqrt{2\hbar^2 \epsilon_0 / \mu R^2} = 4 \sqrt{\epsilon_0 \tilde{U}_0} / \pi = 11,3 \text{ МэВ}$$

и получаем

$$U_0 = \tilde{U}_0 + \delta U_0 \approx 46,7 \text{ МэВ.} \quad (3)$$

Как видно, значение δU_0 существенно больше ϵ_0 . Это естественный результат, так как слабосвязанная с моментом $l = 0$ частица находится в основном вне области действия сил, т. е. вне ямы. Заметим также, что для слабосвязанного состояния, строго говоря, должно быть выполнено условие $\kappa R \ll 1$. Для дейтрона значение $\kappa R \approx 0,4$ не так уж и мало. Тем не менее результат (3) отличается от точного значения 48,1 МэВ лишь на 3%, что неудивительно, так как его точность порядка ϵ_0 / \tilde{U}_0 .

Для слабосвязанного состояния волновая функция имеет вид

$$\chi_E(r) \approx \sqrt{2\kappa} C_{\kappa 0} e^{-\kappa r} \chi_{E=0}(r), \quad (4)$$

где $C_{\kappa 0}$ — асимптотический коэффициент, сравнить с 11.36; для него

$$C_{\kappa 0}^2 = (1 - \kappa r_0)^{-1} = (1 - \kappa R)^{-1} \approx 1,65 \quad (5)$$

(это значение можно получить и непосредственным интегрированием χ_E^2 , если в области ямы положить $e^{-\kappa r}$ равным 1 и выполнить в получающемся выражении разложение с учетом малости κR).

Теперь легко оценить как вероятность нахождения нуклонов в дейтроне вне ямы

$$\omega_{\text{вне}} = \int_R^\infty \chi_E^2(r) dr = C_{\kappa 0}^2 e^{-2\kappa R} \approx 1,65 e^{-0,79} \approx 0,75,$$

так и среднее расстояние между нуклонами

$$\langle r \rangle \approx C_{\kappa 0}^2 / 2\kappa \approx 3,6 \cdot 10^{-13} \text{ см}$$

(в два раза превышающее радиус действия сил).

12.2. Напомним, что магнитным моментом μ_0 некоторой системы, характеризующейся полным моментом J (и другими квантовыми числами), по определению называют среднее значение z -компоненты оператора магнитного момента системы $\hat{\mu}$ в состоянии с проекцией момента $J_z = J$, т. е.

$$\mu_0 = \langle J, J_z = J | \hat{\mu}_z | J, J_z = J \rangle. \quad (1)$$

Для системы, состоящей из протона и нейтрона, имеем

$$\begin{aligned}\hat{\mu} &= \hat{\mu}_{\text{орб}} + \hat{\mu}_{\text{сп}} = \frac{1}{2} \hat{L} + \mu_p \hat{\sigma}_p + \mu_n \hat{\sigma}_n = \\ &= \frac{1}{2} \hat{L} + (\mu_p + \mu_n) \hat{S} + \frac{1}{2} (\mu_p - \mu_n) (\hat{\sigma}_p - \hat{\sigma}_n) \quad (2)\end{aligned}$$

(магнитные моменты выражены в ядерных магнетонах $e\hbar/2m_p c$; орбитальный магнитный момент связан с движением протона и равен $\hat{L}/2$, так как орбитальный момент протона составляет половину полного орбитального момента системы в с.ц.и.).

В синглетных 1L -состояниях ($S=0$) очевидно $\overline{\hat{S}} = \overline{\hat{\sigma}_p} = \overline{\hat{\sigma}_n} = 0$ и $J=L$, так что согласно (1) и (2) имеем $\mu({}^1L) = L/2$; в частности,

$$\mu({}^1S_0) = 0; \quad \mu({}^1P_1) = 1/2; \quad \mu({}^1D_2) = 1 \text{ и т. д.}$$

Для триплетных по спину 3L_J -состояний замечаем, что для них $\overline{(\hat{\sigma}_p - \hat{\sigma}_n)} = 0$ (спиновая функция состояния с $S=1$ симметрична, а оператор $(\hat{\sigma}_p - \hat{\sigma}_n)$ антисимметричен по отношению к перестановке спинов протона и нейтрона), так что из (1) и (2) следует

$$\mu({}^3L_J) = \langle J, J_z = J, L, S \left| \frac{1}{2} \hat{L}_z + (\mu_p + \mu_n) \hat{S}_z \right| J, J_z = J, L, S \rangle. \quad (3)$$

Отсюда, воспользовавшись результатом 3.40, получаем

$$\mu({}^3L_J) = \frac{1}{2(J+1)} \{1,38J(J+1) - 0,38[L(L+1) - 2]\} \quad (4)$$

(учтено, что $S=1$ и подставлены значения μ_p, μ_n); в частности, имеем

$$\mu({}^3S_1) = 0,88; \quad \mu({}^3P_1) = 0,69; \quad \mu({}^3P_0) = 0; \quad \mu({}^3D_1) = 0,31.$$

Для дейтрона экспериментальное значение магнитного момента $\mu_d = 0,86$ свидетельствует о том, что волновая функция дейтрона, имеющего спин $J_d = 1$, представляет суперпозицию S - и D -волн, причем примесь D -волны мала и составляет $w_D \approx 0,04$, сравнить с 12.3.

12.3. Записав волновую функцию дейтрона в виде суперпозиции S - и D -волн, $\Psi_d = \Psi_S + \Psi_D$, где

$$\langle \Psi_d | \Psi_d \rangle = 1, \quad \langle \Psi_S | \Psi_S \rangle = 1 - w_D, \quad \langle \Psi_D | \Psi_D \rangle = w_D \approx 0,04$$

(конкретные выражения для в.ф. $\Psi_{S,D}$ см. в 12.5), находим

$$\bar{\mu} = \int \Psi_S^* \hat{\mu} \Psi_S d\tau + \int \Psi_D^* \hat{\mu} \Psi_D d\tau. \quad (1)$$

Здесь учтено, что интерференционные слагаемые равны нулю:

$$\langle \Psi_S | \hat{\mu} | \Psi_D \rangle = \langle \Psi_D | \hat{\mu} | \Psi_S \rangle = 0.$$

Действительно, так как $\hat{\mu} = \hat{\mu}_{\text{орб}} + \hat{\mu}_{\text{сп}}$, см. 12.2, имеем $\hat{\mu}_{\text{орб}} \Psi_S = \frac{1}{2} \hat{L} \Psi_S = 0$ ($L = 0$ для S -волны), а также

$$\langle \Psi_S | \hat{\mu}_{\text{сп}} | \Psi_D \rangle \propto \langle \Psi_S | \Psi_D \rangle = 0$$

из-за ортогональности в. ф. состояний с различными значениями L . Непосредственным следствием соотношения (1) и является приведенное в условии задачи выражение для μ_d .

Для квадрупольного момента дейтрона, $\hat{Q}_{zz} = e(3z_p^2 - r_p^2)$ ситуация иная, так как интерференционный член уже отличен от нуля:

$$\frac{1}{4} \left\{ \int \Psi_S^* (3z^2 - r^2) \Psi_D d\tau + \int \Psi_D^* (3z^2 - r^2) \Psi_S d\tau \right\} \neq 0.$$

Более того, имея в виду малость примеси D -волны в дейтроне, следует ожидать, что непосредственно ее вклад в квадрупольный момент $\propto \omega_D$ будет существенно меньше вклада интерференционного слагаемого $\propto \sqrt{\omega_D}$.

12.4. Совокупность экспериментальных данных о дейтроне, в том числе и об его магнитном и квадрупольном моментах (сравнить с предыдущими задачами), указывает на то, что его волновая функция представляет суперпозицию S - и D -волн, так что орбитальный момент L не имеет определенного значения, как это должно быть для не зависящих от спина центральных сил. Из приведенных в условии задачи потенциалов только третий, описывающий тензорные силы, может привести к указанному состоянию дейтрона.

Действительно, первый из потенциалов является центральным, хотя для него интенсивность взаимодействия и зависит от значения суммарного спина нуклонов: $\hat{U}_S = -3V(r)$ в состояниях с $S = 0$ и $\hat{U}_S = V(r)$ в случае $S = 1$. Для этого потенциала интегралами движения являются орбитальный момент L и суммарный спин S в отдельности.

Для спин-орбитального взаимодействия векторы L и S в отдельности не сохраняются, интегралом движения является только суммарный момент $J = L + S$. Тем не менее и этот потенциал не может привести к состоянию, представляющему суперпозицию S - и D -волн. Это связано с тем, что хотя для такого потенциала сами векторы L и S не сохраняются, квадраты этих векторов

являются интегралами движения: операторы \hat{L}^2 и \hat{S}^2 коммутируют с оператором спин-орбитального взаимодействия.

Тензорное взаимодействие, в отличие от спин-орбитального, не сохраняет не только вектор L , но и его квадрат. Оно приводит к состоянию, представляющему суперпозицию ${}^3S_1 + {}^3D_1$, и совместно с центральным потенциалом используется для описания свойств дейтрона, см. следующую задачу.

Заметим, в заключение, что потенциал тензорных сил, не сохраняя вектор S , все же сохраняет значение S^2 ; для всех рассмотренных потенциалов интегралами движения являются как полный момент J (и соответственно J^2), так и четность системы.

12.5. Сферически-симметричная волновая функция $\Psi({}^3S_1) = f_0(r)\chi_{S=1}$ описывает состояние с $L = 0$; для него $J = S$, так что эта в. ф. соответствует 3S_1 -волне.

Покажем, что в. ф. $\Psi({}^3D_1) = f_2(r)\hat{S}_{12}\chi_{S=1}$ описывает 3D_1 -состояние. Запишем ее в виде

$$\Psi({}^3D_1) = f_2(r) \{6n_i n_k - 2\delta_{ik}\} \hat{S}_i \hat{S}_k \chi_{S=1}. \quad (1)$$

Угловая часть этой в. ф., $T_{ik} = 6n_i n_k - 2\delta_{ik}$, является симметричным тензором 2-го ранга с равным нулю следом, $T_{ii} = 0$, так что согласно 3.41 можно утверждать, что волновая функция (1) описывает состояние с орбитальным моментом $L = 2$. Далее, так как коммутатор $[\hat{S}^2, \hat{S}_i \hat{S}_k] = 0$, то имеем

$$\hat{S}^2 \Psi({}^3D_1) = f_2(r) \{6n_i n_k - 2\delta_{ik}\} \hat{S}_i \hat{S}_k \hat{S}^2 \chi_{S=1} = 2\Psi({}^3D_1),$$

т. е. волновая функция $\Psi({}^3D_1)$ описывает состояние со спином $S = 1$. Аналогично, из условия коммутативности оператора полного момента системы J_i со скалярным оператором $f_2(r)\hat{S}_{12}$ следует

$$\hat{J}^2 \Psi({}^3D_1) = f_2(r) \{6n_i n_k - 2\delta_{ik}\} \hat{S}_i \hat{S}_k \hat{J}^2 \chi_{S=1} = 2\Psi({}^3D_1)$$

(так как спиновая функция $\chi_{S=1}$ не зависит от углов, то для нее $\hat{J}^2 \chi = \hat{S}^2 \chi = 2\chi$). Таким образом, в. ф. $\Psi({}^3D_1)$ отвечает состоянию с $J = 1$ и действительно соответствует 3D_1 -волне.

Обсудим свойства оператора $\hat{S}_{12} = 6(\hat{S}n)^2 - 2\hat{S}^2$. Учитывая что $(\hat{S}n)^3 = (\hat{S}n)$ для спина $S = 1$, сравнить с 1.21, получаем

$$\hat{S}_{12}^2 = -2\hat{S}_{12} + 4\hat{S}^2 \quad (2)$$

(это соотношение справедливо как для значений $S = 1$, так и в случае $S = 0$, т. е. для всех состояний системы из двух нуклонов).

Далее, воспользовавшись значением интеграла

$$\int n_i n_k d\Omega = \frac{4\pi}{3} \delta_{ik},$$

находим

$$\int \hat{S}_{12} d\Omega = 0, \quad \int \hat{S}_{12}^2 d\Omega = 16\pi \hat{S}^2. \quad (3)$$

Отсюда приходим к условию нормировки для волновой функции дейтрона в виде рассматриваемой суперпозиции 3S_1 и 3D_1 волн:

$$\langle \Psi_d | \Psi_d \rangle = 4\pi \int_0^\infty \{ |f_0(r)|^2 + 8 |f_2(r)|^2 \} r^2 dr = 1, \quad (4)$$

при этом $\langle \chi_{S=1} | \chi_{S=1} \rangle = 1$, а также к отмеченному в условии задачи результату об отсутствии сдвига 3S_1 -уровня

$$E^{(1)} = \langle \Psi({}^3S) | \hat{U}_T | \Psi({}^3S) \rangle = 0$$

под влиянием тензорного взаимодействия в первом порядке теории возмущений.

Наконец, уравнение Шрёдингера для дейтрона

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U} \right) \Psi_d = E_d \Psi_d$$

(m — приведенная масса системы) с учетом соотношения (2) сводится к системе двух дифференциальных уравнений для радиальных функций $\tilde{f}_{0,2} = r f_{0,2}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \tilde{f}_0'' + [U_S(r) - E_d] \tilde{f}_0 + 8U_T(r) \tilde{f}_2 = 0, \quad (5)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{3\hbar^2}{mr^2} + U_S(r) - 2U_T(r) - E_d \right] \tilde{f}_2 + U_T(r) \tilde{f}_0 = 0.$$

Заметим, имея в виду состояния непрерывного спектра, что тензорное взаимодействие вызывает переходы между состояниями с различными (но одинаковой четности!) значениями орбитального момента L лишь в триплетных по спину, $S = 1$, состояниях. В синглетных состояниях, $S = 0$, тензорные силы отсутствуют и орбитальный момент является интегралом движения, совпадая с J .

В заключение, в связи с рассмотренным видом волновой функции дейтрона, укажем на соотношение

$$\langle \hat{J} \rangle = \chi^* \hat{S} \chi,$$

сравнить с 5.21.

12.6. 1) Ввиду аналогии свойств изоспина и обычного спина изоспиновые волновые функции Ψ_{TT_3} двухнуклонной системы

с определенными значениями суммарного изоспина T и его проекции T_z могут быть найдены как в 5.10, см. (XII. 1) и (XII. 2):

$$\begin{aligned}\Psi_{11} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \equiv \Psi_p(1) \Psi_p(2); \\ \Psi_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \equiv \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_p(1) \Psi_n(2) + \Psi_n(1) \Psi_p(2) \}; \\ \Psi_{1,-1} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \equiv \Psi_n(1) \Psi_n(2); \\ \Psi_{00} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \equiv \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_p(1) \Psi_n(2) - \Psi_n(1) \Psi_p(2) \}.\end{aligned}\tag{1}$$

Подчеркнем, что в состояниях $\Psi_{T, T_z=0}$ каждый из нуклонов не находится в определенном зарядовом состоянии, а с вероятностью $1/2$ может находиться как в протонном, так и в нейтронном состояниях. Поэтому взаимодействие, сохраняющее изоспин, носит, вообще говоря, обменный характер.

2) Согласно изотопической симметрии протон и нейтрон рассматриваются как различные зарядовые (или изотопические) состояния одной и той же частицы — нуклона. Так как нуклон является фермионом, то волновая функция системы нуклонов должна быть антисимметричной по отношению к перестановке всех переменных — координатных, спиновых и изоспиновых — любых двух нуклонов (обобщенный принцип Паули).

Так как для системы из двух нуклонов:

а) перестановка координат эквивалентна инверсии относительно центра масс системы и поэтому симметрия координатной функции с данным значением орбитального момента L совпадает с четностью $(-1)^L$,

б) симметрия спиновой функции для состояний с суммарным спином S относительно перестановки спиновых переменных определяется множителем $(-1)^{S+1}$,

в) симметрия изоспиновой волновой функции, аналогично спиновой, дается множителем $(-1)^{T+1}$,
то волновая функция Ψ_{LST} состояния с определенными значениями квантовых чисел L , S и T при перестановке нуклонов умножается на $(-1)^{L+S+T}$; при этом из условия антисимметричности

в. ф. следует соотношение

$$(-1)^T = (-1)^{L+S+1}. \quad (2)$$

Так, в состояниях с $S = 1$ и четными значениями L — как, например, у дейтрона, см. 12.5, — изоспин двух нуклонов $T = 0$ (при этом аналогичные состояния в системе из двух одинаковых нуклонов — двух протонов или двух нейтронов, соответствующие $T = 1$, запрещены принципом Паули, см. 10.9).

3) Изоспиновая часть волновой функции дейтрона, имеющего $T = 0$, описывается функцией Ψ_{00} из выражений (1).

12.7. В состояниях 3P и 1P протон-нейтронная система имеет различные значения изоспина, соответственно $T = 1$ и 0 , см. предыдущую задачу. Это означает, что взаимодействие, приводящее к состоянию в виде суперпозиции ${}^1P_1 + {}^3P_1$, не сохраняет изоспин, т. е. не является изоскаляром. Так как в рассматриваемом состоянии суммарный спин (обычный) также не имеет определенного значения, то обсуждаемое взаимодействие не сохраняет и спин. В качестве примера такого взаимодействия можно указать

$$\hat{U} = V(r) (\hat{\sigma}_1 \hat{\tau}_3^{(1)} + \hat{\sigma}_2 \hat{\tau}_3^{(2)}) \hat{I} = \frac{1}{2} V(r) (\hat{\sigma}_p - \hat{\sigma}_n) \hat{I}.$$

Заметим, что это взаимодействие не только не является изотопически симметричным, но даже не является и зарядово независимым, сравнить с 12.8.

12.8. Так как для протона и нейтрона $\tau_{zp} = +1/2$ и $\tau_{zn} = -1/2$, то для рассматриваемого взаимодействия в различных зарядовых состояниях имеем

$$\hat{U}_{pp} = \hat{U}_{nn} = \hat{V}_1 + \frac{1}{4} \hat{V}_2, \quad \hat{U}_{pn} = \hat{V}_1 - \frac{1}{4} \hat{V}_2.$$

Равенство $\hat{U}_{pp} = \hat{U}_{nn}$ свидетельствует о зарядовой независимости рассматриваемого взаимодействия. Однако оно не обладает изотопической инвариантностью, так как представляет суперпозицию изоскаляра \hat{V}_1 и компоненты изотензора $\hat{V}_2 \hat{\tau}_3^{(1)} \hat{\tau}_3^{(2)}$, сравнить с 12.9. Поэтому взаимодействие в рп-системе отличается от взаимодействия в системе из двух одинаковых нуклонов.

12.9. 1) Искомый оператор, являющийся скаляром в изопространстве, может выражаться только через следующие изоскалярные операторы:

$$1, \hat{\tau}_{1,2}^2, \hat{\tau}_1^2 \hat{\tau}_2^2, \dots, \hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2, (\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2)^2, \dots$$

здесь $\hat{\tau}_{1,2}$ — (изовекторные) операторы изоспина отдельных нуклонов. Однако из всех этих операторов независимыми являются только два: 1 и $\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2$. Действительно, операторы $\hat{\tau}_1^2 = \hat{\tau}_2^2 = 3/4$.

т. е. кратны единичному оператору, а степени оператора $\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2$ линейно выражаются через 1 и $\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2$, так как

$$(\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2)^2 = \frac{3}{16} - \frac{1}{2} (\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2),$$

сравнить с 5.12. Соответственно, наиболее общий вид искомого оператора в изопространстве есть

$$\hat{U} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 (\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2), \quad (1)$$

где $\hat{V}_{1,2}$ — уже не зависящие от изоспина операторы в координатном и спиновом пространствах, симметричные относительно перестановки нуклонов.

Так как $\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2 = \frac{1}{2} \hat{T}^2 - \frac{3}{4}$, где \hat{T} — оператор суммарного изоспина двуноуклонной системы, то согласно соотношению (1) для взаимодействия в состояниях с определенным значением T получаем

$$\hat{U}(T=0) = \hat{V}_1 - \frac{3}{4} \hat{V}_2, \quad \hat{U}(T=1) = \hat{V}_1 + \frac{1}{4} \hat{V}_2. \quad (2)$$

Отсюда можно выразить $\hat{V}_{1,2}$ через $\hat{U}(T)$ и записать взаимодействие (1) в виде

$$\hat{U} = \frac{1}{4} (\hat{U}_0 + 3\hat{U}_1) + (\hat{U}_1 - \hat{U}_0) \hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2, \quad (3)$$

где $\hat{U}_{0,1} \equiv \hat{U}(T=0, 1)$.

2) В двухноуклонной системе кулоновское взаимодействие отличается от нуля лишь в случае, когда оба нуклона находятся в протонном зарядовом состоянии. Так как оператор заряда нуклона

$$\hat{q}_N = \frac{e}{2} (1 + 2\hat{\tau}_3),$$

то оператор кулоновского взаимодействия нуклонов имеет вид

$$\hat{U}_{\text{кул}} = \frac{e^2}{4|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} (1 + 2\hat{\tau}_3^{(1)}) (1 + 2\hat{\tau}_3^{(2)}). \quad (4)$$

Отметим, что кулоновское взаимодействие нарушает как изотопическую инвариантность, так и зарядовую независимость ядерных сил, сравнить с предыдущими задачами.

12.10. Если бы изотопическая симметрия была строгим законом природы, то свойства ядер трития и гелия ${}^3\text{He}$ (как и любой пары *зеркальных* ядер) — их массы, энергетические уровни и их квантовые числа — были бы одинаковыми и β -распад был бы запрещен законом сохранения энергии (фактически в данной

задаче речь идет о более низкой форме симметрии взаимодействия нуклонов — зарядовой независимости ядерных сил).

Нарушение зарядовой независимости ядерных сил, проявляющееся и в различии масс ядер ${}^3\text{H}$ и ${}^3\text{He}$, а соответственно и в энергиях покоя Mc^2 ядер, связано с электромагнитным взаимодействием. Это различие определяется, в основном ¹⁾, двумя факторами: разницей масс m_p, n , протона и нейтрона, а также энергией кулоновского взаимодействия протонов в ядре ${}^3\text{He}$; при этом

$$[M({}^3\text{H}) - M({}^3\text{He})] c^2 = (m_n - m_p) c^2 - \int \frac{e^2}{r} |\Psi|^2 d\tau,$$

где Ψ — в. ф. ядра ${}^3\text{He}$, а $r = r_1 - r_2$ — расстояние между протонами. Отсюда, с учетом соотношения

$$m_e c^2 + e_0 = [M({}^3\text{H}) - M({}^3\text{He})] c^2,$$

находим

$$\bar{U}_{\text{кул}} = \left\langle \frac{e^2}{r} \right\rangle = (m_n - m_p - m_e) c^2 - e_0 \approx 1,5 m_e c^2 \approx 0,77 \text{ Мэв},$$

что позволяет получить оценку среднего расстояния между нуклонами и размера R рассматриваемых ядер:

$$R \sim \langle r \rangle \sim \left[\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \right]^{-1} \approx 1,9 \cdot 10^{-13} \text{ см}$$

(напомним, что $e^2/a_v \approx 27$ эВ, $a_v \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ см).

12.11. Имея в виду соображения о разности масс зеркальных ядер, высказанные в предыдущей задаче, и учитывая значение $U_{\text{кул}} = 3(Ze)^2/5R$ электростатической энергии равномерно заряженного шара с зарядом Ze и радиусом R , находим

$$e_0 = - (m_n - m_p) c^2 + \frac{3(2Z+1)e^2}{5(2Z+1)^{1/3} r_0},$$

где последнее слагаемое представляет разность электростатических энергий для двух шаров радиуса $R = r_0 A^{1/3}$ с зарядами $(Z+1)e$ и Ze соответственно, при этом $A = 2Z+1$. Отсюда

$$r_0 = \frac{3(2Z+1)}{5(2Z+1)^{1/3}} \frac{e^2}{(e_0 + \Delta)},$$

¹⁾ При этом пренебрегается как взаимодействием магнитных моментов нуклонов в ядре (оно много меньше кулоновского взаимодействия), так и влиянием электромагнитного взаимодействия непосредственно на ядерный потенциал.

где $\Delta = (m_n - m_p)c^2 \approx 1,29 \text{ МэВ}$, и из данных, основанных на β -распаде ядра ^{27}Si , получаем $r_0 \approx 1,6 \cdot 10^{-13} \text{ см}$.

12.12. Задача определения одночастичных энергетических уровней и соответствующих им собственных функций из уравнения Шрёдингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - U_0 + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right] \Psi_N = E_N \Psi_N$$

фактически была решена ранее, см. 4.4. При этом

$$E_N = -U_0 + \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right); \quad N = 2n_r + l = 0, 1, 2, \dots$$

Каждому уровню с данным значением N отвечают одночастичные состояния $\Psi_{n_r l m}$ с орбитальными моментами $l = N, N-2, \dots, 1(0)$; кратность вырождения уровня $G(N) = (N+1)(N+2)/2$ (без учета спина нуклона).

N		$G(N)$	$n(N)$	$M(N)$
6	4s, 3d, 2g, 1i	28	56	168
5	3p, 2f, 1h	21	42	112
4	3s, 2d, 1g	15	30	70
3	2p, 1f	10	20	40
2	2s, 1d	6	12	20
1	1p	3	6	8
0	1s	1	2	2

Рис. 42

На рис. 42 изображен спектр одночастичных уровней для рассматриваемого потенциала. Справа указаны следующие числа: $G(N)$ — кратность вырождения уровня; $n(N) = 2G(N)$ — максимальное число нуклонов каждого зарядового состояния (т. е. как протонов, так и нейтронов), которые могут находиться на соответствующем уровне (удвоение значения $G(N)$ связано со спином нуклона); $M(N)$ — максимальное число нуклонов каждого зарядового состояния, которые могут быть размещены по всем уровням, начиная с нижнего и кончая рассматриваемым, при этом $M(N+1) = M(N) + n(N+1)$.

Найденные числа $M(N)$, равные 2, 8, 20, 40, 70, ..., представляют значения магических чисел для рассматриваемой модели.

Специфической особенностью осцилляторного потенциала является случайное вырождение уровней. Если слегка изменить на $\delta U(r)$ этот потенциал, то случайное вырождение снимется, что

приведет к расщеплению каждого уровня на столько подуровней, сколько различных значений l ему отвечает²⁾). Это обстоятельство иллюстрируется рис. 43, на котором схематически изображена картина расщепления уровней с $N = 3$ и 4.

Предсказания значений полных моментов (спинов) J ядер в рассматриваемой модели носят весьма неопределенный характер (исключая легчайшие и дважды магические ядра) ввиду большой кратности вырождения уровней по J . Однако предсказания

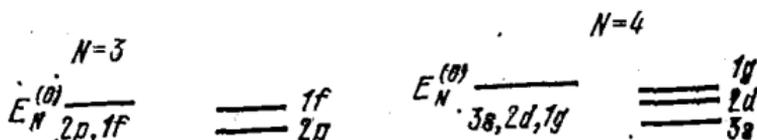


Рис. 43

четностей основных состояний ядер — вполне определенные, что связано с одинаковой четностью, равной $P = (-1)^l = (-1)^N$ всех одночастичных состояний, отвечающих уровню с данным значением N , и с тем обстоятельством, что четность является мультипликативным квантовым числом. Так, для основного состояния ядра $^{13}_6\text{C}$ модель предсказывает отрицательную четность, для ядра $^{17}_8\text{O}$ — положительную и т. д.

Оценку значения параметра $\hbar\omega$ для ядер с $A \approx 2Z \gg 1$ можно получить, отождествив размер ядра $R = r_0 A^{1/3}$, где $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13}$ см, с «радиусом» $R(N_{\max})$ квазиклассической орбиты нуклона на верхнем из заполненных уровней, определяемым из соотношения

$$m\omega^2 R^2(N_{\max}) = \hbar\omega (2N_{\max} + 3).$$

Отсюда, учитывая оценку $N_{\max} = (3A/2)^{1/3}$, следующую из условия

$$A = \sum_{N \leq N_{\max}} 4G(N) \approx \sum_{N \leq N_{\max}} 2N^2 \approx \frac{2}{3} N_{\max}^3$$

(сумму можно заменить интегралом), находим

$$\hbar\omega \approx 2N_{\max} \hbar^2 / m r_0^2 A^{2/3} \approx 60 A^{-1/3} \text{ МэВ.}$$

12.13. Энергетические уровни частицы со спином в центральном потенциале не зависят от ее спинового состояния и опреде-

2) Порядок расположения подуровней по l зависит от конкретного вида возмущения $\delta U(r)$. Заметим также, что характерное для осцилляторного потенциала случайное вырождение и порядок следования уровней с различными значениями l в квазиклассическом приближении справедливы и для достаточно произвольных потенциалов, см. правила квантования из 9.7.

ляются лишь квантовыми числами n_r, l (но не l_z, s_z). При наличии спин-орбитального взаимодействия уровень частицы со спином $s = 1/2$ с данным значением l расщепляется на два подуровня, отвечающие значениям $j = l \pm 1/2$ полного момента (за исключением s -уровней). В этом случае «хорошими» квантовыми числами являются: полный момент j , его проекция j_z и четность $P = (-1)^l$ (хотя вектор l не сохраняется, его квадрат по-прежнему является интегралом движения: оператор \hat{l}^2 коммутирует с гамильтонианом). Соответственно собственные функции гамильтониана могут быть выбраны в виде

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = f(r) \Psi_{j l j_z}(n),$$

где спин-орбитальные функции $\Psi_{j l j_z}$ обсуждалась в 5.24 (впрочем, их явный вид для дальнейшего не существует).

Так как оператор $\hat{l}\hat{\sigma} = \hat{j}^2 - \hat{l}^2 - 3/4$ в состояниях частицы с определенными значениями квантовых чисел j и l также имеет определенное значение

$$\hat{l}\hat{\sigma} = \begin{cases} l, & \text{в состоянии с } j = l + 1/2, \\ -l - 1, & \text{в состоянии с } j = l - 1/2, \end{cases}$$

то рассматриваемое спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению и сдвигу на

$$\Delta E_{jl} = \begin{cases} \alpha(l+1), & j = l - 1/2, \\ -\alpha l, & j = l + 1/2 \end{cases} \quad (1)$$

невозмущенного уровня $E_{n_r l}$ независимо от конкретного вида центрального потенциала $U(r)$. Соответственно энергетические уровни для рассматриваемой модели описываются выражением

$$E_{n_r j l} = -U_0 + \hbar\omega \left(2n_r + l + \frac{3}{2} \right) + \Delta E_{jl}. \quad (2)$$

Как видно, ширина расщепления уровня

$$\Delta E_l = E_{j=l-1/2, l} - E_{j=l+1/2, l} = (2l+1)\alpha, \quad l \neq 0,$$

возрастает с ростом l . Для вырожденных уровней осциллятора максимальное значение орбитального момента $l_{\max} = N$, так что для них полное расщепление составляет

$$\Delta E_N = (2N+1)\alpha, \quad N \geq 1.$$

Отметим также, что среднее значение смещения уровней с учетом их статистических весов, равных $2j+1$, обращается в нуль, так как

$$\sum_j (2j+1) \Delta E_{jl} = 0.$$

На рис. 44 слева изображено расщепление уровня невозмущенного осциллятора с $N = 2$, а справа представлена картина нижних одночастичных уровней для рассматриваемой модели. Она лишь взаимной перестановкой $2s_{1/2}$ - и $1d_{3/2}$ -уровней отличается от последовательности, определяемой непосредственно из анализа экспериментальных данных (следует, однако, иметь в виду, что при заполнении одночастичных уровней иногда возникают нерегулярности, как и в случае заполнения электронных оболочек в атомах).

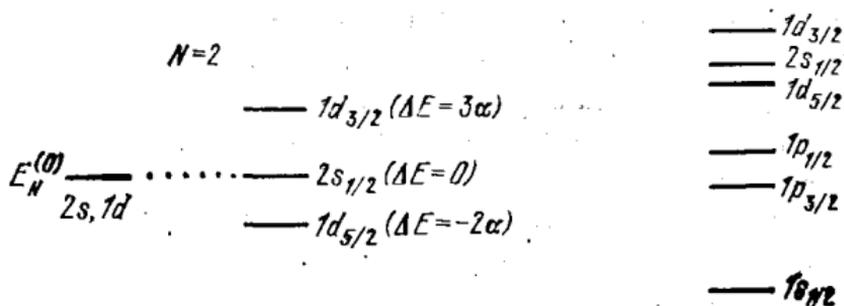


Рис. 44

Имея в виду, что основное состояние ядра в модели оболочек определяется размещением нуклонов по нижним одночастичным уровням с учетом принципа Паули, полный момент J и четность P нуклонов заполненных оболочек равны $J^P = 0^+$, а квантовые числа «дырочного» состояния такие же, как у соответствующего одночастичного уровня, приходим к следующим предсказаниям в отношении спинов и четностей основных состояний указанных в условии задачи ядер.

1) У ядер ^{12}C , ^{14}C , ^{16}O , ^{40}Ca квантовые числа $J^P = 0^+$ (эти ядра имеют лишь заполненные как по протонам, так и по нейтронам оболочки).

2) Ядра ^{13}C , ^{13}N , ^{17}O , ^{27}Al имеют сверх заполненных оболочек лишь один нуклон (протон или нейтрон) или одну дырку, квантовые числа которых определяют J^P этих ядер: $(1/2)^-$, $(1/2)^-$, $(5/2)^+$, $(5/2)^+$ соответственно.

3) Предсказания модели в отношении спина (но не четности) ядер ^6He , ^6Li , ^{10}B неоднозначны. Так, для ядра ^6Li , имеющего сверх заполненной оболочки $(1s)^4$ протон и нейтрон в состоянии $1p_{3/2}$, согласно модели J^P может принимать одно из следующих значений: 3^+ , 2^+ , 1^+ , 0^+ . Аналогично предсказание и для ядра ^{10}B , имеющего по одной протонной и нейтронной дырке на оболочке $1p_{3/2}$. Ядро ^6He имеет два нейтрона в состоянии $1p_{3/2}$ сверх заполненной оболочки $(1s)^4$, и согласно модели возможные значения J^P есть 2^+ и 0^+ (квантовые числа 3^+ и 1^+ запрещены принципом Паули, сравнить с 12.6). Однако если иметь в виду *спаривательный* характер остаточного взаимодействия

нейтронов, то для ядра ${}^3\text{He}$, как и для любого четно-четного ядра, предсказание однозначно: $J^P = 0^+$.

12.14. В рассматриваемых ядрах три нуклона находятся на оболочке $1s$. Такую конфигурацию можно рассматривать как одну дырку в $1s$ -состоянии, чем и определяются квантовые числа — спин, четность и изотопический спин — этих ядер: $J^P = (1/2)^+$, $T = 1/2$ (при этом $T_3 = -1/2$ и $+1/2$ для ядер ${}^3\text{H}$ и ${}^3\text{He}$ соответственно).

Орбитальная (координатная) часть волновых функций ядер симметрична относительно перестановки координат нуклонов (так как все они находятся в одном и том же $1s$ -состоянии). Соответственно спин-изоспиновая часть в. ф. должна быть антисимметричной (сравнить с 12.6). Ее явный вид определяется согласно общему правилу антисимметризации волновой функции системы тождественных фермионов в случае, когда указаны занятые одночастичные состояния. Для краткости записи ниже будем использовать для одночастичных спин-изоспиновых волновых функций обозначения вида: $p_{\uparrow}(1)$ — в. ф. 1-го нуклона в протонном зарядовом состоянии с определенным значением $s_z = +1/2$ проекции спина и т. п.

Если три нуклона занимают состояния p_{\uparrow} , p_{\downarrow} и n_{\uparrow} , то спин-изоспиновая часть в. ф. такого состояния системы в целом определяется детерминантом

$$\Psi_{T_3=1/2, S_z=1/2} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} p_{\uparrow}(1) & p_{\downarrow}(1) & n_{\uparrow}(1) \\ p_{\uparrow}(2) & p_{\downarrow}(2) & n_{\uparrow}(2) \\ p_{\uparrow}(3) & p_{\downarrow}(3) & n_{\uparrow}(3) \end{vmatrix}. \quad (1)$$

Эта в. ф. соответствует ядру ${}^3\text{He}$ в состоянии с $J_z = +1/2$.

Сделав в выражении (1) замены $p \leftrightarrow n$, получим спин-изоспиновую в. ф. ядра ${}^3\text{H}$ с $J_z = +1/2$. Аналогично, замены $\uparrow \leftrightarrow \downarrow$ дают в. ф. рассматриваемых состояний с $J_z = -1/2$.

12.15. Так как момент и изоспин полностью заполненной нуклонами обеих зарядовых состояний оболочки равны нулю, то спин ядра J и его изоспин T определяются нуклонами сверх заполненных оболочек. При этом возможные значения J и T для ядра ограничиваются условием антисимметричности волновой функции таких нуклонов (в соответствии с обобщенным принципом Паули, сравнить с 12.6).

Имея в виду характер симметрии изоспиновой части в. ф. двух нуклонов: ее симметричность при значении $T = 1$ и антисимметричность при $T = 0$ относительно перестановки изоспиновых переменных нуклонов, а также характер симметрии в. ф. двух моментов одинаковой величины, в данной задаче $j_1 = j_2 = 1/2$, по отношению к перестановке их j_z -переменных в $j_{1z}j_{2z}$

представлении (в данном случае эта симметрия совпадает с симметрией спин-угловой части волновой функции), см. 3.30: симметричность в.ф. для значений $J = 2j, 2j - 2, \dots$ и антисимметричность ее для $J = 2j - 1, 2j - 3, \dots$ и, наконец, учитывая одинаковую радиальную зависимость в.ф. обоих нуклонов, заключаем:

- 1) для $T = 1$ возможны лишь значения $J = 2j - 1, 2j - 3, \dots$,
- 2) для $T = 0$ возможны лишь значения $J = 2j, 2j - 2, \dots$

12.16. Для $T = 1$ возможны лишь значения $J = 2$ и 0 , а для $T = 0$ — лишь $J = 3$ и 1 .

12.17. Имея в виду порядок расположения однонуклонных уровней, установленный в 12.13, замечаем, что рассматриваемые ядра содержат сверх заполненных оболочек лишь один нуклон (или имеют только одну дырку). Именно им (или дыркой) определяются спин J и четность P ядра, а согласно (XII.4) и магнитный момент μ :

Ядро	J^P	μ	Ядро	J^P	μ
${}^2\text{H} (p (1s_{1/2}))$	$1/2^+$	2,79	${}^{13}\text{N} (p (1p_{1/2}))$	$1/2^-$	-0,26
${}^3\text{He} (n (1s_{1/2}))$	$1/2^+$	-1,91	${}^{17}\text{O} (n (1d_{5/2}))$	$5/2^+$	-1,91
${}^{11}\text{B} (p (1p_{3/2})^{-1})$	$3/2^-$	3,79	${}^{29}\text{Si} (n (2s_{1/2}))$	$1/2^+$	-1,91
${}^{13}\text{C} (n (1p_{1/2}))$	$1/2^-$	0,64			

(в таблице указана нуклонная конфигурация ядра лишь сверх заполненных оболочек; запись $(nlj)^{-1}$ означает дырку в состоянии nlj).

Согласие рассчитанного и экспериментального значений μ вполне удовлетворительное, за исключением ядер ${}^{11}\text{B}$ и ${}^{29}\text{Si}$.

12.18. В модели оболочек магнитный момент, спин и четность ядра определяются нуклонами сверх заполненных оболочек. В рассматриваемом случае оператор магнитного момента ядра принимает вид ³⁾

$$\hat{\mu} = g_p \hat{j}_p + g_n \hat{j}_n, \quad (1)$$

где $g_{p,n}(l, j)$ — гиромангнитные множители для протона и нейтрона в состоянии l_j , см. таблицу (XII.4). Усредняя этот оператор, с помощью результата 3.40 находим магнитный момент ядра с нуклонной конфигурацией $p(nl_j)^1 n(nl_j)^1$ при спине ядра J

³⁾ Сравнить с 12.20.

(при этом $\hat{J} = \hat{j}_p + \hat{j}_n$, а $j_p = j_n = j$):

$$\mu(J) = \langle J, J_z = J | \hat{\mu}_z | J, J_z = J \rangle = \frac{1}{2} [g_p(l, j) + g_n(l, j)] J. \quad (2)$$

Эта формула определяет также магнитный момент ядра, имеющего по одной протонной и нейтронной дырке в состоянии nl . Согласно (2) получаем

Ядро	J	μ
${}^2\text{H} (p(1s)^1, n(1s)^1)$	1	0,88
${}^6\text{Li} (p(1p_{3/2})^1, n(1p_{3/2})^1)$	1	0,63
${}^{10}\text{B} (p(1p_{3/2})^{-1}, n(1p_{3/2})^{-1})$	3	1,89
${}^{14}\text{N} (p(1p_{1/2})^1, n(1p_{1/2})^1)$	1	0,38

(о вычислении μ в схеме LS -связи см. 12.19 и 12.21).

12.19. В условиях задачи оператор магнитного момента ядра

$$\hat{\mu} = g_L \hat{L} + g_S \hat{S},$$

где $g_{L, S}$ — орбитальный и спиновый гиромагнитные множители для нуклонов незаполненной оболочки. Усредняя этот оператор согласно 3.40, находим

$$\begin{aligned} \mu(L, S, J) &= \langle J, J_z = J | \hat{\mu}_z | J, J_z = J \rangle = \\ &= \frac{1}{2(J+1)} \{ (g_L + g_S) J(J+1) + \\ &\quad + (g_L - g_S) [L(L+1) - S(S+1)] \}, \quad (1) \end{aligned}$$

здесь L, S — полные орбитальный и спиновый моменты нуклонов, которые в схеме LS -связи, наряду с J , характеризуют состояние ядра.

Найдем $g_{L, S}$ для протон-нейтронной системы. Оператор орбитального магнитного момента для нее (сравнить с 12.21)

$$\hat{\mu}_{\text{орб}} = g_{l, p} \hat{l}_p + g_{l, n} \hat{l}_n$$

(орбитальные гиромагнитные множители $g_{l, p} = 1$ и $g_{l, n} = 0$) и он принимает вид $\hat{\mu}_{\text{орб}} = g_L \hat{L}$ лишь после усреднения по состоянию системы с определенным значением L . Как и выше, с помощью 3.40 получаем (при этом $l_p = l_n$):

$$\mu_L = g_L L \quad g_L = \frac{1}{2} (g_{l, p} + g_{l, n}) = \frac{1}{2}. \quad (2)$$

Аналогично находим

$$\mu_S = g_S S, \quad g_S = \frac{1}{2} (g_{s,p} + g_{s,n}) = 0,88 \quad (3)$$

и согласно (1), (2), (3) приходим к искомому значению

$$\mu(L, S, J) = 0,69J - \frac{0,19}{(J+1)} [L(L+1) - S(S+1)]. \quad (4)$$

В применении к ядру ${}^6\text{Li}$ с $J = 1$ формула (4) дает при различных значениях L, S (совместимых с $J = 1$)

$$\begin{aligned} \mu(0, 1, 1) &= 0,88 \quad (T = 0); & \mu(2, 1, 1) &= 0,31 \quad (T = 0), \\ \mu(1, 0, 1) &= 0,50 \quad (T = 0); & \mu(1, 1, 1) &= 0,69 \quad (T = 1), \end{aligned}$$

здесь также указаны значения изоспина T для соответствующих состояний ядра, сравнить с 12.6 и 12.15. Совокупность экспериментальных данных о свойствах ядра ${}^6\text{Li}$ указывает на «предпочтительный» характер LS -связи в этом ядре, при этом $L = 0, S = 1$.

12.20. Оператор магнитного момента нуклона в состоянии nl_j может быть записан в виде (сравнить с 12.9)

$$\hat{\mu}_N = g_p(l, j) \left(\frac{1}{2} + \hat{\tau}_3 \right) \hat{j} + g_n(l, j) \left(\frac{1}{2} - \hat{\tau}_3 \right) \hat{j},$$

где гиромагнитные множители $g_{p,n}$ определяются (XII.3) и (XII.4). Соответственно для ядра

$$\hat{\mu} = \frac{1}{2} (g_p + g_n) \sum_a \hat{j}_a + (g_p - g_n) \sum_a \hat{\tau}_{3a} a \hat{j}_a, \quad (1)$$

где сумма берется по всем нуклонам на (незаполненной) оболочке nl_j . При усреднении этого оператора по состоянию ядра с определенным значением изоспина T вторая сумма обращается в нуль ввиду того, что в условиях задачи $T_3 = 0$; действительно,

$$\langle T, T_3 = 0 | \hat{\tau}_{3a} | T, T_3 = 0 \rangle \propto \langle T, T_3 = 0 | \hat{T}_3 | T, T_3 = 0 \rangle = 0.$$

Поэтому магнитный момент ядра определяется первой суммой в

(1), и так как $\sum_a \hat{j}_a = \hat{J}$, то для него получаем

$$\mu(J) = \frac{1}{2} [g_p(l, j) + g_n(l, j)] J. \quad (2)$$

Ядро ${}^{22}_{11}\text{Na}$ в основном состоянии имеет нуклонную конфигурацию $p(1d_{5/2})^3 n(1d_{5/2})^3$ сверх заполненных оболочек, см. схему одночастичных уровней в 12.13. Учтя значения $g_{p,n}(l, j)$, находим согласно (2) предсказание модели оболочек для магнитного

момента $\mu_{\text{обол}} = 1,74$ ядра ^{22}Na (имеющего $J = 3$), практически совпадающее с экспериментальным значением $\mu_{\text{эксп}} = 1,75$.

12.21. Оператор магнитного момента нуклона

$$\hat{\mu}_N = (g_{l,p} \hat{l} + g_{s,p} \hat{s}) \left(\frac{1}{2} + \hat{\tau}_3 \right) + (g_{l,n} \hat{l} + g_{s,n} \hat{s}) \left(\frac{1}{2} - \hat{\tau}_3 \right),$$

где гиромангнитные множители $g_{l,p} = 1$, $g_{l,n} = 0$, $g_{s,p} = 5,59$, $g_{s,n} = -3,83$. Соответственно для ядра имеем

$$\hat{\mu} = g_L \hat{L} + g_S \hat{S} + \sum_a [(g_{lp} - g_{ln}) \hat{l}_a + (g_{sp} - g_{sn}) \hat{s}_a] \hat{\tau}_{3a}, \quad (1)$$

$$\hat{L} = \sum_a \hat{l}_a, \quad \hat{S} = \sum_a \hat{s}_a, \quad g_L = \frac{g_{lp} + g_{ln}}{2} = \frac{1}{2},$$

$$g_S = \frac{g_{sp} + g_{sn}}{2} = 0,88,$$

где сумма берется по всем нуклонам в незаполненной оболочке (сравнить с формулой (1) предыдущей задачи, определяющей магнитный момент в схеме jj -связи).

После усреднения выражения (1) по состоянию ядра, отвечающему определенному значению изоспина T и его проекции $T_3 = 0$, последнее слагаемое (сумма) обращается в нуль. Соответственно магнитный момент такого ядра определяется лишь первой, *изоскалярной* частью, $\hat{\mu}_{\text{изоск}} = g_L \hat{L} + g_S \hat{S}$, оператора $\hat{\mu}$ и равен

$$\mu(L, S, J) = \frac{(g_L + g_S) J(J+1) + (g_L - g_S) [L(L+1) - S(S+1)]}{2(J+1)}, \quad (2)$$

сравнить с 12.19 и 12.20.

12.22. Оператор магнитного момента ядра, в котором все нуклоны сверх заполненных оболочек находятся в одинаковых состояниях nl_j , имеет вид (сравнить с 12.20)

$$\hat{\mu} = \frac{1}{2} [g_p(l, j) + g_n(l, j)] \hat{J} + [g_p(l, j) - g_n(l, j)] \sum_a \hat{\tau}_{3a} \hat{j}_a.$$

После соответствующего усреднения (сравнить с 12.18 и 12.21) для магнитного момента ядра получаем

$$\mu = \mu_{\text{изоск}} + \mu_{\text{изовек}},$$

где

$$\mu_{\text{изоск}} = \frac{1}{2} (g_p + g_n) J, \quad \mu_{\text{изовек}} = (g_p - g_n) \left\langle \left| \sum_a \hat{\tau}_{3a} \hat{j}_{za} \right| \right\rangle. \quad (1)$$

Так как зеркальные ядра, обозначим их A и \bar{A} , различаются лишь знаком проекции изоспина T_z , то для них *изоскалярные* части магнитного момента одинаковы, а *изовекторные* части имеют противоположные знаки, так что

$$\mu(A) + \mu(\bar{A}) = [g_p(l, j) + g_n(l, j)] J. \quad (2)$$

Применительно к зеркальным ядрам ${}^3\text{H}$ и ${}^3\text{He}$ согласно (2) получаем

$$\mu({}^3\text{H}) + \mu({}^3\text{He}) = 0,88,$$

а экспериментальное значение составляет 0,78 (см. 12.17).

12.23. Напомним, что квадрупольным моментом ядра по определению называется среднее значение

$$Q_0 = \langle J, J_z = J | \sum_p (3z_p^2 - r_p^2) | J, J_z = J \rangle.$$

Для рассматриваемых ядер доминирующий вклад в Q_0 вносит лишь протон сверх заполненных оболочек, поэтому

$$Q_0 \approx \int \Psi_{nll}^* (3 \cos^2 \theta - 1) \Psi_{nll} r^2 dV, \quad (1)$$

где Ψ_{nllz} — в. ф. такого протона, при этом $J = j$ и $J_z = j_z$. Так как в данной задаче $j = l + 1/2$, то волновая функция имеет вид

$$\Psi_{nll} = Y_{ll}(n) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} f(r), \quad |Y_{ll}|^2 = \frac{(2l+1)!!}{2^{l+2}\pi^{l+1}} \sin^{2l} \theta.$$

При этом согласно (1) имеем

$$Q_0 = \frac{(2l+1)!!}{2^{l+2}\pi^{l+1}} \int (3 \cos^2 \theta - 1) \sin^{2l} \theta d\Omega \langle r_p^2 \rangle, \quad (2)$$

где

$$\langle r_p^2 \rangle = \langle njlj | r^2 | njlj \rangle = \int_0^\infty r^4 f^2(r) dr$$

— среднее значение квадрата радиуса-вектора для рассматриваемого протона.

Элементарное интегрирование в выражении (2) по углам дает

$$a) Q_0(s_{1/2}) = 0; \quad б) Q_0(p_{3/2}) = -\frac{2}{5} \langle r_p^2 \rangle;$$

$$в) Q_0(d_{5/2}) = -\frac{4}{7} \langle r_p^2 \rangle$$

(обратить внимание на знак Q_0 ; см. также две следующие задачи).

При вычислении квадрупольного момента пренебрегалось вкладом протонов заполненных оболочек. Они дают сферически симметричное распределение заряда, квадрупольный момент которого относительно центра симметрии равен нулю. Вклад же их в Q_0 , определяемый относительно центра масс ядра, составляет $\sim Z/A^2 \ll 1$ от величины (2), сравнить с 12.26.

Заметим в заключение, что квадрупольные моменты ядер, имеющих соответственно один протон сверх заполненных оболочек и одну протонную дырку, различаются знаком (в противоположность магнитным моментам таких ядер).

12.24. Квадрупольный момент определяется формулой (2) предыдущей задачи. Переписав ее в виде

$$Q_0 = \int (3 \cos^2 \theta - 1) |Y_{ll}|^2 d\Omega \langle r_p^2 \rangle \quad (1)$$

и воспользовавшись соотношением

$$\sin^2 \theta \cdot |Y_{ll}|^2 = \frac{2l+2}{2l+3} |Y_{l+1, l+1}|^2$$

(см. выражение для $|Y_{ll}|^2$ в 12.23), в формуле (1) легко выполнить интегрирование и получить

$$Q_0 = -\frac{2l}{2l+3} \langle r_p^2 \rangle = -\frac{2j-1}{2j+2} \langle r_p^2 \rangle. \quad (2)$$

В заключение сделаем замечание о знаке $Q_0 < 0$ и предельном значении $Q_0 = -\langle r_p^2 \rangle$ при $j \rightarrow \infty$. Оба эти свойства представляются естественными, если заметить, что в классическом пределе траектория частицы с $J_z = J$ лежит в экваториальной плоскости (при этом $z = 0$ и из выражения для Q следует $Q_0 = -\langle r_p^2 \rangle$).

12.25. Выражение для Q_0 через значение полного момента протона j , полученное в предыдущей задаче, остается справедливым и в случае $j = l - 1/2$. Этот результат непосредственно следует из отмеченного в 5.25 одинакового вида угловых распределений плотности вероятности в состояниях, описываемых волновыми функциями $\Psi_{j l_1 (2) j_z}$ с $l_{1,2} = j \pm 1/2$.

Соответственно сделанные в двух предыдущих задачах замечания о знаке квадрупольного момента ядра непосредственно переносятся и на рассматриваемый случай.

12.26. В приближении, в котором центр масс ядра совпадает с центром масс системы нуклонов замкнутых оболочек, квадрупольный момент ядра в условиях данной задачи равен нулю (сравнить с 12.23).

Руководствуясь указанием к условию задачи, замечаем, что центр сферического распределения заряда нуклонов заполненных оболочек, совпадающий с их центром масс, находится в точке

$$r_{\text{обол}} = -r_n / (A - 1),$$

где r_n — радиус-вектор нейтрона относительно центра масс ядра. При этом квадрупольный момент ядра связан с протонами заполненных оболочек, определяется выражением

$$Q_0^{(n)} = \frac{Z}{(A-1)^2} \langle \Psi_{n11j} | (3 \cos^2 \theta - 1) r^2 | \Psi_{n11j} \rangle$$

(сравнить с 12.23), где Ψ_{n11j_z} — в. ф. нейтрона, и равен

$$Q_0^{(n)} = - \frac{2j-1}{2j+2} \frac{Z}{(A-1)^2} \langle r_n^2 \rangle, \quad (1)$$

как это непосредственно следует из результатов двух предыдущих задач; при этом спин ядра $J = j$. Заметим, что $Q_0^{(n)} < 0$.

12.27. Основному состоянию ядра соответствует распределение нуклонов по нижним одночастичным уровням с учетом принципа Паули. В пренебрежении кулоновским взаимодействием уровни для протона и нейтрона одинаковы. При этом для ядра с $A = 2Z$ в основном состоянии будут заняты одни и те же одночастичные протонные и нейтронные уровни.

Обозначив через ε_F максимальную энергию занятых состояний (см. рис. 45, постоянная $-U_0$ в потенциале опущена), замечаем, что объем фазового пространства, соответствующий занятым состояниям в объеме dV , равен

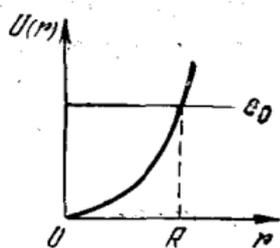


Рис. 45

$$d\Gamma = \frac{4\pi p_F^3}{3} dV = \frac{4\pi}{3} (2m\varepsilon_F - m^2\omega^2 r^2)^{3/2} dV.$$

Разделив его на $(2\pi\hbar)^3$, получим число занятых орбитальных состояний. В каждом из них находится по четыре нуклона (в различных зарядовых или спиновых состояниях), так что общее число нуклонов в объеме dV составляет

$$dN = \frac{2}{3\pi^2\hbar^3} (m\omega R)^3 \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{3/2} dV, \quad r \leq R = \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{m\omega^2}}. \quad (1)$$

Соответственно плотность нуклонов в ядре описывается выражением

$$n(r) = \frac{2}{3\pi^2\hbar^3} (m\omega R)^3 \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{3/2}, \quad r \leq R \quad (2)$$

(при этом $n_p = n_n = n/2$; для $r > R$, очевидно, $n \equiv 0$).

Условие нормирования выражений (1), (2) на полное число нуклонов приводит к соотношению

$$\frac{1}{\hbar} m \omega R^2 = (12A)^{1/3}$$

между параметрами ω и R рассматриваемой модели ядра и позволяет записать выражение (2) в виде

$$n(r) = \frac{8A}{\pi^2 R^3} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{3/2}, \quad r \leq R \quad (3)$$

(нормировочный интеграл вычисляется подстановкой $r/R = \sin u$).

Заметим, что для тяжелых ядер выражение (3), основанное на осцилляторном самосогласованном потенциале, противоречит экспериментальным данным, согласно которым для таких ядер плотность нуклонов почти постоянна, за исключением узкой области вблизи границы, сравнить с 12.28.

12.28. Задача решается аналогично предыдущей. Теперь, однако, граничный импульс внутри ядра постоянен, $p = \sqrt{2m\epsilon_F}$, так что вместо формулы (2) предыдущей задачи получаем

$$n(r) = \frac{2p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3} = \text{const}, \quad r < R. \quad (1)$$

Нормировка на полное число нуклонов A дает $(p_F R)^3 = 9\pi A \hbar^3 / 8$, или

$$p_F = \frac{1}{2} (9\pi)^{1/3} \frac{\hbar}{r_0} \quad (2)$$

с учетом выражения для R .

Соответствующая такому импульсу p_F максимальная скорость нуклонов в ядре (рассматриваемом в условиях задачи как идеальный ферми-газ) составляет

$$v_F = \frac{p_F}{m} = \frac{1}{2} (9\pi)^{1/3} \frac{m_e}{m} \frac{a_B}{r_0} \frac{\hbar}{m_e a_B} \approx \frac{c}{4}$$

(здесь $m/m_e \approx 1840$, $a_B \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ см, $v_{ат} = \hbar/m_e a_B = c/137$, c — скорость света), а максимальная кинетическая энергия $\epsilon_F \approx \approx 30$ МэВ $\ll mc^2 \approx 940$ МэВ, так что нуклоны в ядре еще можно рассматривать как нерелятивистские.

12.29. Будем нумеровать индексами i и f частицы в начальном и конечном состояниях, так что

$$q_{i,f} = \frac{1}{2} Y_{i,f} + T_{z; i,f}$$

Из закона сохранения заряда следует $\sum q_i = \sum q_f$, а из сохранения изоспина ⁴⁾ имеем $\sum T_{3,i} = \sum T_{3,f}$. Отсюда получаем $\sum Y_i = \sum Y_f$, что и означает сохранение гиперзаряда.

Заметим, что так как среднее значение \bar{T}_3 для частиц данного изомультиплета равно нулю, то гиперзаряд равен удвоенному среднему электрическому заряду частиц в изомультиплете.

12.30. Искомый оператор в изопространстве должен выражаться через следующие: единичный 1, операторы компонент изоспина нуклона $\hat{\tau}_i$ и пиона \hat{t}_k и быть изотопическим скаляром. Так как операторы $\hat{\tau}$, \hat{t} являются изовекторными операторами, то из них можно построить только следующие изоскалярные операторы: $\hat{\tau}^2$, \hat{t}^2 , $(\hat{\tau}\hat{t})$, а также различные комбинации этих операторов. Однако все они линейно выражаются через два оператора: 1 и $\hat{\tau}\hat{t}$, сравнить с 12.9. Действительно, операторы $\hat{\tau}^2 = 3/4$ и $\hat{t}^2 = 2$ кратны единичному, а для $\hat{\tau}\hat{t}$ справедливо соотношение $(\hat{\tau}\hat{t})^2 = (1 - \hat{\tau}\hat{t})/2$. Оно следует, например, из 1.21, если заметить, что оператор $\hat{\tau}\hat{t} = \hat{T}^2/2 - 11/8$ имеет лишь два различных с. з., равных -1 и $+1/2$ (в состояниях с суммарным значением изоспина πN -системы $T = 1/2$ и $3/2$, соответственно).

Таким образом, искомый оператор имеет вид

$$\hat{U} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 (\hat{\tau}\hat{t}), \quad (1)$$

где $\hat{V}_{1,2}$ — операторы в конфигурационном пространстве, не зависящие от изоспина. Отсюда находим вид операторов $\hat{U}(T)$ πN -взаимодействия в состояниях с определенным значением $T = 1/2$ и $3/2$ суммарного изоспина:

$$\hat{U}(T = 1/2) = \hat{V}_1 - \hat{V}_2, \quad \hat{U}(T = 3/2) = \hat{V}_1 + \frac{1}{2} \hat{V}_2, \quad (2)$$

а также связь \hat{U} с этими операторами:

$$\hat{U} = \frac{1}{3} [\hat{U}(1/2) + 2\hat{U}(3/2)] - \frac{2}{3} [\hat{U}(1/2) - \hat{U}(3/2)] \hat{\tau}\hat{t}. \quad (3)$$

12.31. Задача решается аналогично предыдущей. Различие проявляется в том, что теперь оператор $\hat{t}_1\hat{t}_2 = \frac{1}{2} \hat{T}^2 - 2$ имеет три различных с. з., равных -2 , -1 , $+1$, соответственно значениям 0, 1, 2 суммарного изоспина пионов. Поэтому независимыми изоскалярными операторами являются 1, $\hat{t}_1\hat{t}_2$ и $(\hat{t}_1\hat{t}_2)^2$ (при этом

⁴⁾ Фактически достаточно сохранения лишь T_3 -компоненты изоспина.

$(\hat{t}_1 \hat{t}_2)^3 = 2 + (\hat{t}_1 \hat{t}_2) - 2(\hat{t}_1 \hat{t}_2)^2$, а изотопически инвариантное $\pi\pi$ -взаимодействие имеет вид

$$\hat{U}_{\pi\pi} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 (\hat{t}_1 \hat{t}_2) + \hat{V}_3 (\hat{t}_1 \hat{t}_2)^2. \quad (1)$$

Операторы взаимодействия пионов в состояниях с определенными значениями изоспина:

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\pi\pi} (T=0) &= \hat{V}_1 - 2\hat{V}_2 + 4\hat{V}_3; & \hat{U}_{\pi\pi} (T=1) &= \hat{V}_1 - \hat{V}_2 + \hat{V}_3; \\ \hat{U}_{\pi\pi} (T=2) &= \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3. \end{aligned}$$

12.32. Так как оператор заряда пиона связан с оператором его t_3 -компоненты изоспина соотношением $\hat{q}_\pi = e \hat{t}_3$ (сравнить с 12.29, $e > 0$), то оператор кулоновского взаимодействия двух пионов имеет вид

$$\hat{U}_{\text{кул}} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \hat{t}_3^{(1)} \hat{t}_3^{(2)}.$$

12.33. Оператор кулоновского πN -взаимодействия

$$\hat{U}_{\text{кул}} = \frac{e^2}{2|\mathbf{r}_\pi - \mathbf{r}_N|} (1 + 2\hat{t}_3) \hat{t}_3,$$

сравнить с 12.9 и 12.32.

12.34. Изотопическая инвариантность предполагает, что различные частицы, относящиеся к одному и тому же изомультиплету, следует рассматривать как тождественные частицы, находящиеся в различных зарядовых состояниях. При этом квантово-механический принцип неразличимости тождественных частиц распространяется и на различные частицы одного и того же изомультиплета. В частности, при взаимной перестановке двух пионов, являющихся бесспиновыми бозонами, волновая функция системы должна оставаться неизменной (быть симметричной).

Для двухпионной системы перестановка пространственных переменных пионов эквивалентна отражению координат относительно центра масс, так что симметрия координатной в.ф. совпадает с четностью $(-1)^L$. Симметрия же изоспиновой части в.ф. определяется множителем $(-1)^T$, где T — суммарный изоспин системы, как это следует из результата 3.30 с учетом аналогии свойств момента и изоспина (и значения $T_\pi = 1$). Отсюда, ввиду симметричности волновой функции двухпионной системы, следует $(-1)^{L+T} = 1$, так что возможные значения L и T — одинаковой четности: в состояниях с четным L — лишь $T = 0$ и 2 , с нечетным L — лишь $T = 1$.

12.35. Для пиона $T_\pi = 1$, $T_3(\pi^0) = 0$. Ввиду аналогии свойств момента и изоспина, решение данной задачи дублирует

решение 3.32. Приведем ответ:

$$w(T=2) = \frac{2}{3}, \quad w(T=1) = 0, \quad w(T=0) = \frac{1}{3}, \quad \bar{T}^2 = 4.$$

12.36. В рассматриваемых зарядовых состояниях πN -системы t_3 -компоненты изоспина нуклона и пиона имеют определенные значения⁵⁾. Поэтому, учитывая аналогию свойств момента и изоспина, решение данной задачи может быть получено аналогично 3.29. Приведем окончательные результаты для \bar{T}^2 и вероятностей $w(T)$ значений суммарного изоспина πN -системы $T = 1/2$ и $3/2$ в рассматриваемых изотопических состояниях:

- 1) для $\pi^+ p$ - и $\pi^- n$ -систем $w(3/2) = 1$, $T^2 = 15/4$;
- 2) для $\pi^+ n$ - и $\pi^- p$ -систем $\bar{T}^2 = 7/4$, $w(1/2) = 2/3$, $w(3/2) = 1/3$;
- 3) для $\pi^0 p$ - и $\pi^0 n$ -систем $\bar{T}^2 = 11/4$, $w(1/2) = 1/3$, $w(3/2) = 2/3$.

12.37. Задачу можно решить различными способами. Например, учитывая аналогию свойств момента и изоспина, можно воспользоваться коэффициентами Клебша — Гордана. Для случая сложения двух одинаковых моментов в результирующий момент, равный нулю, они были найдены в 3.39. В применении к рассматриваемой задаче результат 3.39 дает

$$\Psi_{T=0}(2\pi) = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \psi_1(1) \psi_{-1}(2) - \psi_0(1) \psi_0(2) + \psi_{-1}(1) \psi_1(2) \} \quad (1)$$

Здесь $\Psi_{T=0}(2\pi)$ — изоспиновая в.ф. состояния двух пионов с $T=0$, а $\psi_{t_3}(1(2))$ — изоспиновые в.ф. отдельных пионов с определенным значением компоненты t_3 изоспина ($t_3 = \pm 1, 0$).

Вероятности распада частицы f^0 в различные зарядовые состояния двухпионной системы, $\pi^+\pi^-$ и $2\pi^0$, пропорциональны вероятностям нахождения пионов в таких состояниях при суммарном изоспине $T=0$ (в силу сохранения изоспина в распаде). Согласно (1) вероятность зарядового состояния с двумя π^0 равна $w_{T=0}(2\pi^0) = (1/\sqrt{3})^2 = 1/3$ (напомним, что $t_3(\pi^0) = 0$); соответственно $w_{T=0}(\pi^+\pi^-) = 2/3$, так что

$$\frac{w(f^0 \rightarrow \pi^+\pi^-)}{w(f^0 \rightarrow 2\pi^0)} = 2. \quad (2)$$

Приведем два других способа решения.

1) Рассмотрим распад некоторого числа N частиц f^0 . В результате их распада образуются $Nw(f^0 \rightarrow \pi^+\pi^-)$ заряженных

⁵⁾ Напомним, что для пиона $T_\pi = 1$ и $T_3(\pi^\pm) = \pm 1$, $T_3(\pi^0) = 0$.

π^+ -мезонов, столько же π^- и $2N\omega (f^0 \rightarrow 2\pi^0)$ незаряженных пионов (в распаде $f^0 \rightarrow 2\pi^0$ образуется сразу два π^0). Исходная система из f^0 является изотопически симметричной (изотропной в изопространстве, так как $T_1 = 0$). Также изотопически симметричным должно быть конечное состояние, включающее распадающиеся пионы. Отражением этой симметрии должно быть одинаковое число пионов в различных зарядовых состояниях π^+ , π^- , π^0 , что сразу приводит к установленному выше другим способом соотношению (2).

Приведенное решение представляется очень наглядным с физической точки зрения. Оно может быть обобщено и на случаи более сложных (в отношении изоспина) распадов и реакций, см., например, 12.39.

2) Воспользуемся результатом из 1.43, согласно которому $|\Psi_A(B)|^2 = |\Psi_B(A)|^2$. Будем понимать под \hat{B} операторы $\hat{t}_3^{(1)}$, $\hat{t}_3^{(2)}$ компонент изоспина отдельных пионов, а под \hat{A} — операторы \hat{T}^2 , \hat{T}_3 квадрата суммарного изоспина и его компоненты. Приведенное соотношение при этом принимает вид (сравнить с 3.33)

$$|\Psi_{TT_3}(t_3^{(1)}, t_3^{(2)})|^2 = |\Psi_{t_3^{(1)}t_3^{(2)}}(T, T_3)|^2. \quad (3)$$

Положив здесь $T = 0$, $t_3^{(1)} = t_3^{(2)} = 0$, получаем

$$w_{T=0}(2\pi^0) = w_{2\pi^0}(T=0) = \frac{1}{3}, \quad (4)$$

где использовано значение вероятности суммарного изоспина $T = 0$ в системе из $2\pi^0$, полученное в 12.35. Указанный способ решения основан на возможности вычисления в ряде случаев коэффициентов Клебша — Гордана (точнее, их квадратов) с помощью соотношения (3).

12.38. Изоспиновую в. ф. трехпионного состояния с суммарным изоспином $T = 0$ легко найти, имея в виду формальную аналогию свойств момента и изоспина, если учесть следующие обстоятельства.

1) Возможность описания изотопического состояния отдельного пиона, имеющего $t_\pi = 1$, с помощью вектора Φ в изопространстве. При этом связь векторного представления с обычно используемым t_3 -представлением такая же, как и в случае момента, см. 3.44; так, пион в зарядовом состоянии π^0 , т. е. с $t_3 = 0$, описывается в изопространстве вектором Φ_{π^0} с компонентами $\Phi_{\pi^0} = (0, 0, 1)$.

2) Волновая функция состояния с изоспином $T = 0$ является скаляром (или псевдоскаляром) в изотопическом пространстве (не изменяется при вращениях в этом пространстве).

3) Из трех векторов Φ_a , описывающих изоспиновые состояния отдельных пионов, можно построить лишь одну скалярную (точнее, псевдоскалярную) изоспиновую в.ф. трехпионной системы:

$$\Psi_{T=0}(3\pi) = \Phi_1 [\Phi_2 \Phi_3] = \varepsilon_{ikl} \Phi_{1i} \Phi_{2k} \Phi_{3l}. \quad (1)$$

Найденная изоспиновая функция антисимметрична относительно перестановки изоспиновых переменных любых двух пионов. Поэтому она не содержит слагаемого, отвечающего нахождению всех трех пионов в одинаковом зарядовом состоянии, что и доказывает невозможность указанного в условии задачи распада (при сохранении изоспина).

12.39. Распады частиц Δ^{++} , Δ^- происходят по одному зарядовому каналу, а частиц Δ^+ , Δ^0 — по двум:

$$\begin{aligned} \Delta^{++} &\rightarrow \pi^+ p, & \Delta^- &\rightarrow \pi^- n, \\ \Delta^+ &\rightarrow \begin{cases} \pi^+ n, & \omega_1, \\ \pi^0 p, & \omega_2, \end{cases} & \Delta^0 &\rightarrow \begin{cases} \pi^- p, & \omega_1, \\ \pi^0 n, & \omega_2. \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

Заметим, что в силу изотопической инвариантности вероятности распада в единицу времени для всех частиц одного и того же изомультиплета одинаковы⁶⁾. Также одинаковы и относительные вероятности различных каналов распадов, являющихся зеркальным отражением друг друга в изопространстве (как, например, распады $\Delta^+ \rightarrow \pi^+ n$ и $\Delta^0 \rightarrow \pi^- p$).

Для расчета относительных вероятностей распадов $\omega_{1,2}$ частиц Δ^+ , Δ^0 заметим, что они определяются вероятностями реализации соответствующих зарядовых состояний πN -системы с учетом того, что она находится в изотопическом состоянии с $T = 3/2$ и $T_3 = \pm 1/2$. Изоспиновая в.ф. πN -системы, образующейся при распаде Δ^+ , имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi_{T=3/2, T_3=1/2} &= C_1 |\pi^+ n\rangle + C_2 |\pi^0 p\rangle = \\ &= C_1 \psi_1(\pi) \psi_{-1/2}(N) + C_2 \psi_0(\pi) \psi_{1/2}(N), \end{aligned}$$

где $\psi_{t_3}(\pi(N))$ являются нормированными изоспиновыми в.ф. пиона (нуклона) в состоянии с определенным значением t_3 -компоненты изоспина. При этом величины $|C_1|^2$ и $|C_2|^2$ определяют вероятности различных зарядовых состояний ($\pi^+ n$ и $\pi^0 p$ соответственно) πN -системы, а тем самым и вероятности распада Δ по

⁶⁾ Одним из следствий нарушения изотопической симметрии является различие масс частиц данного изомультиплета. Это отражается на энергосодержании в распаде и в случае сравнительно малой его величины может существенно отразиться на соотношениях между вероятностями распадов по различным каналам.

различными каналам: $\omega_1 = |C_1|^2$ и $\omega_2 = |C_2|^2$. Имея в виду аналогию свойств момента и изоспина, замечаем, что $C_{1,2}$ представляют фактически соответствующие коэффициенты Клебша — Гордана и легко могут быть найдены по известным формулам для этих коэффициентов. Впрочем, их значения $C_1 = 1/\sqrt{3}$ и $C_2 = \sqrt{2/3}$ были получены в 5.18. Отсюда следуют искомые соотношения

$$\frac{w(\Delta^+ \rightarrow \pi^+ p)}{w(\Delta^+ \rightarrow \pi^0 p)} = \frac{w(\Delta^0 \rightarrow \pi^- p)}{w(\Delta^0 \rightarrow \pi^0 p)} = \frac{1}{2}. \quad (2)$$

Приведем еще два способа расчета вероятностей, не требующие предварительного вычисления коэффициентов $C_{1,2}$.

Первый из них основан на наглядных физических соображениях. Рассмотрим изотопически неполяризованный «пучок» частиц Δ , в котором все зарядовые состояния Δ представлены в одинаковом количестве N_0 . Среди продуктов распада — пионов и нуклонов — различные зарядовые состояния будут представлены в следующем количестве:

$$\begin{aligned} N(\pi^+) &= N(\pi^-) = N_0(1 + \omega_1), \\ N(\pi^0) &= 2N_0\omega_2 = 2N_0(1 - \omega_1). \end{aligned}$$

Из физических соображений представляется очевидным, что «пучок» распадных пионов в изопространстве также будет неполяризованным и различные зарядовые состояния пиона будут представлены в нем одинаково: $N(\pi^+) = N(\pi^-) = N(\pi^0)$. Отсюда находим $\omega_1 = 1/3$ и приходим к соотношению (2).

Отметим, что при этом «пучок» распадных нуклонов, естественно, также является неполяризованным, т. е. $N(p) = N(n)$.

Второй способ основан на использовании соотношения (3) из 12.37. Получить результат (2) таким образом читателю предлагается самостоятельно, сравнить с 12.37.

12.40. Поступая как и в предыдущей задаче, находим

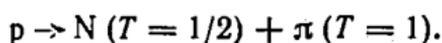
$$\frac{w(N^{*+} \rightarrow \pi^+ p)}{w(N^{*+} \rightarrow \pi^0 p)} = \frac{w(N^{*0} \rightarrow \pi^- p)}{w(N^{*0} \rightarrow \pi^0 p)} = 2.$$

12.41. Поскольку изоспины $T_d = 0$, $T_\pi = 1$, то конечные состояния обеих рассматриваемых реакций являются различными изоспиновыми состояниями одной и той же физической системы «пион + дейтрон» с изоспином $T = 1$, отличающимися лишь значением T_3 -компоненты изоспина. В силу сохранения изоспина рассматриваемые реакции происходят лишь в состояниях начальной нуклон-нуклонной системы с $T = 1$. При этом в реакции $pp \rightarrow d\pi^+$ оба нуклона находятся как раз в требуемом изотопическом состоянии с $T = 1$ (и $T_3 = 1$), в то время как в реак-

ции $p \rightarrow \Delta \pi^0$ требуемое изотопическое состояние системы нуклонов с $T = 1$ и $T_3 = 0$ представлено лишь с вероятностью $1/2$. С такой же вероятностью представлено состояние нуклон-нуклонной системы с изоспином $T = 0$ (эти утверждения являются непосредственным следствием аналогии свойств момента (спина) и изоспина).

По условию отбора сечений обе реакции совершенно одинаковы в смысле координатных и спиновых степеней свободы, так что в силу изотопической инвариантности отношение их сечений равно отношению вероятностей необходимого изотопического состояния с $T = 1$ в начальных состояниях, т. е. 2, что и требовалось доказать.

12.42. Так как $T_d = 0$, то в смысле изоспина дейтрон в рассматриваемых реакциях играет роль «катализатора» в процессе «диссоциации» протона на нуклон и пион:



В начальной стадии процесса $T = 1/2$, $T_3 = 1/2$ и в силу сохранения изоспина такие же значения T и T_3 имеет πN -система в конечном состоянии. По условию отбора сечений обе рассматриваемые реакции совершенно одинаковы в смысле координатных и спиновых степеней свободы, так что в силу изотопической инвариантности отношение их сечений равно отношению «весов» зарядовых состояний $\pi^+ p$ и $\pi^0 p$ в пион-нуклонной системе с $T = 1/2$ и $T_3 = 1/2$. Последнее отношение равно 2 (сравнить с 12.40 и 12.36), что и доказывает утверждение задачи.

12.43. Поскольку по условию рассматриваемые реакции идут только через состояние с изоспином $T = 3/2$ и совершенно одинаковы в смысле координатных и спиновых степеней свободы, то их сечения пропорциональны вероятностям («весам») требуемого изотопического состояния с $T = 3/2$ как в начальных, так и в конечных состояниях пион-нуклонной системы

$$d\sigma \propto w_i (T = 3/2) \cdot w_f (T = 3/2). \quad (1)$$

Требуемые вероятности были вычислены в 12.36 (см. также 12.39) и равны: 1 — для $\pi^+ p$, $2/3$ — для $\pi^0 p$ и $1/3$ — для $\pi^- p$ -систем. Отсюда непосредственно следует соотношение

$$d\sigma (I) : d\sigma (II) : d\sigma (III) = 9 : 2 : 1 \quad (2)$$

между сечениями рассматриваемых реакций (заметим, что доминирующая роль взаимодействия с $T = 3/2$ в πN -системе проявляется в окрестности Δ -резонанса).

12.44. Реакции



являются «зеркальным» отражением друг друга в изопространстве. Поэтому в силу изотопической инвариантности дифференциальные сечения этих реакций при одинаковых импульсах и спинах соответствующих «зеркальных» частиц (p и n , π^+ и π^-) совпадают. Подчеркнем, что замена частиц их «зеркальными» изотопическими партнерами должна производиться на обеих стадиях процесса — начальной и конечной. Это означает, что импульсные и спиновые характеристики протона и нейтрона в начальных состояниях рассматриваемых реакций должны быть взаимно заменены.

Глава 13

СТОЛКНОВЕНИЯ ЧАСТИЦ

13.1. Вычисления амплитуды рассеяния в борновском приближении по формулам (XIII.6, 8) и полного сечения рассеяния согласно

$$\sigma(E) = \int |f|^2 d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f|^2 \sin\theta d\theta = \frac{\pi\hbar^2}{2mE} \int_0^{\sqrt{8mE/\hbar^2}} f^2(q) dq^2 \quad (1)$$

($q = 2k \sin(\theta/2)$) приводят к следующим результатам.

$$a) f = -\frac{2m\alpha R^2}{\hbar^2(1+q^2R^2)}, \quad \sigma(E) = 16\pi \left(\frac{m\alpha R^2}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{1+4k^2R^2}. \quad (2)$$

При конечном значении R сечение рассеяния имеет также конечную величину. Однако при $R \rightarrow \infty$ рассматриваемый короткодействующий потенциал Юкавы переходит в дальнедействующий кулоновский потенциал $U = \alpha/r$. При этом дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega = 4m^2\alpha^2/\hbar^4q^4$ описывается формулой Резерфорда, а полное сечение рассеяния — бесконечно.

$$b) f = -\frac{2m\alpha R^2}{\hbar^2} \frac{\sin qR}{qR},$$

$$\sigma(E) = \frac{4\pi m\alpha^2 R^2}{\hbar^2 E} \int_0^{\sqrt{8mER^2/\hbar^2}} \frac{\sin^2 x}{x} dx. \quad (3)$$

В предельных случаях отсюда имеем:

$$\sigma(E) \underset{E \rightarrow 0}{\approx} \frac{16\pi(m\alpha R^2)^2}{\hbar^4}, \quad \sigma(E) \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\pi m\alpha^2 R^2}{\hbar^2 E} \ln \frac{8mER^2}{\hbar^2}$$

(при $E \rightarrow \infty$ интеграл в (3) расходится; для вычисления его расходящейся части следует заменить осциллирующий множитель

$\sin^2 x$ средним значением, равным $1/2$).

$$в) \quad f = - \frac{4mU_0R^3}{\hbar^2(1+q^2R^2)^2},$$

$$\sigma(E) = \frac{8\pi mR^4U_0^2}{3\hbar^2E} \left[1 - \frac{1}{(1+8mER^2/\hbar^2)^3} \right]. \quad (4)$$

$$з) \quad f = - \frac{\pi m \alpha}{\hbar^2 q} = - \frac{\pi m \alpha}{2\hbar^2 k \sin(\theta/2)}. \quad (5)$$

Полное сечение рассеяния бесконечно, что связано с достаточно медленным убыванием потенциала на больших расстояниях; о рассеянии на потенциале $U = \alpha/r^2$ см. также 13.19.

$$д) \quad f = \frac{2mU_0R}{\hbar^2q^2} \left(\cos qR - \frac{\sin qR}{qR} \right), \quad (6)$$

$$\sigma(E) = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{mU_0R^2}{\hbar^2} \right)^2 \left[1 - \frac{1}{(2kR)^2} + \frac{\sin 4kR}{(2kR)^3} - \frac{\sin^2 2kR}{(2kR)^4} \right].$$

В предельных случаях имеем

$$\sigma(E) \underset{E \rightarrow 0}{\approx} \frac{16\pi m^2 U_0^2 R^6}{9\hbar^4}, \quad \sigma(E) \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\pi m U_0^2 R^4}{\hbar^2 E}$$

(случай $E \rightarrow \infty$ см. также в 13.2).

$$е) \quad f = - \frac{\sqrt{\pi} m U_0 R^3}{2\hbar^2} e^{-q^2 R^2/4}, \quad (7)$$

$$\sigma(E) = \frac{\pi^2 m U_0^2 R^4}{4\hbar^2 E} (1 - e^{-4mER^2/\hbar^2}).$$

Ввиду экспоненциального убывания $f(q)$ борновское приближение неприменимо при достаточно больших значениях q^2 (см. 13.13). Соответственно и учет в выражении для $\sigma(E)$ при больших значениях E экспоненциально малого слагаемого является превышением точности.

13.2. В борновском приближении амплитуда рассеяния $f_B(q)$, см. (XIII.6), как и фурье-компонента потенциала $\tilde{U}(q)$,

$$f_B(q) = - \frac{m}{2m\hbar^2} \tilde{U}(q), \quad \tilde{U}(q) = \int e^{-iqr} U(r) dr$$

существенно отлична от нуля лишь при $qR \ll 1$ (R — радиус потенциала), так как при $qR \gg 1$ интеграл мал из-за быстрых осцилляций подынтегральной функции, связанных с множителем e^{-iqr} . Так как $q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$, то из условий $kR \gg 1$ и

$qR \ll 1$ следует известный факт, что рассеяние быстрых частиц происходит в основном под малыми углами $\theta \sim 1/kR \ll 1$, при этом $q \approx k\theta \sim R^{-1}$.

Для дальнейших преобразований разложим вектор q на две составляющие: $q = q_{\parallel} + q_{\perp}$, где вектор q_{\parallel} направлен вдоль k_0

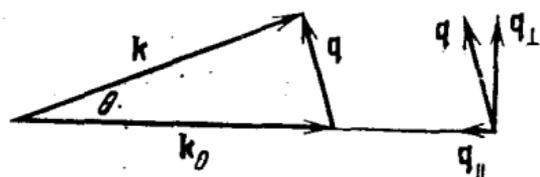


Рис. 46

(импульса частицы до рассеяния), а $q_{\perp} \perp k_0$, рис. 46. При $\theta \ll 1$ имеем

$$q_{\parallel} = k(1 - \cos \theta) \approx \frac{1}{2} k\theta^2, \quad q_{\perp} = k \sin \theta \approx k\theta,$$

так что $q_{\perp} \gg q_{\parallel}$. При этом $q \approx q_{\perp}$ и

$$\tilde{U}(q) \approx \tilde{U}(q_{\perp}) = \iiint e^{-iq_{\perp} \cdot \rho} U(\rho, z) dz d^2\rho. \quad (1)$$

Далее, величина $k^2 d\Omega$ ($d\Omega$ — элемент телесного угла, заключающий направления импульсов рассеянных частиц) представляет элемент площади сферы радиуса k . Часть сферы вблизи полярной оси, направленной вдоль k_0 , можно рассматривать как плоскую поверхность, перпендикулярную k_0 , и поэтому $k^2 d\Omega = dS = dq_{\perp x} dq_{\perp y} = d^2q_{\perp}$. Соответственно

$$\sigma(E) = \int |f_B|^2 d\Omega \approx \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4 k^2} \iint |\tilde{U}(q_{\perp})|^2 d^2q_{\perp}.$$

Воспользовавшись здесь выражением (1), имеем

$$\sigma(E) = \frac{m}{8\pi^2 \hbar^2 E} \iint \left[\iiint e^{-iq_{\perp} \cdot \rho} U(\rho, z) dz d^2\rho \right] \times \\ \times \left[\iiint e^{iq_{\perp} \cdot \rho'} U(\rho', z') dz' d^2\rho' \right] d^2q_{\perp}.$$

После выполнения интегрирования по q_{\perp} :

$$\iint \exp[-iq_{\perp}(\rho - \rho')] d^2q_{\perp} = (2\pi)^2 \delta(\rho - \rho'), \quad (2)$$

благодаря δ -функции сразу можно проинтегрировать по ρ' и получить

$$\sigma_{E \rightarrow \infty}(E) = \frac{m}{2\hbar^2 E} \iint \left[\int_{-\infty}^{\infty} U(\rho, z) dz \right]^2 d^2\rho. \quad (3)$$

Для потенциалов $U = U_0 \exp(-r^2/R^2)$ и прямоугольной ямы (барьера) по формуле (3) получаем

$$\sigma(E) = \frac{\pi^2 m U_0^2 R^4}{4 \hbar^2 E} \quad \text{и} \quad \sigma(E) = \frac{\pi m U_0^2 R^4}{\hbar^2 E}$$

соответственно, сравнить с 13.1*б*, *е*.

Аналогичным образом можно найти энергетическую зависимость при $E \rightarrow \infty$ транспортного сечения

$$\sigma_{\text{tr}}(E) = \int (1 - \cos \theta) d\sigma \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{m^2}{8\pi^2 \hbar^4 k^4} \iint q_{\perp}^2 |\tilde{U}(\mathbf{q}_{\perp})|^2 d^2 q_{\perp}.$$

Теперь вместо (2) появляется интеграл вида

$$\iint q^2 e^{-i\mathbf{q}\rho} d^2 q = -(2\pi)^2 \Delta_{\perp} \delta(\rho).$$

После несложных преобразований для случая центрального потенциала получаем

$$\sigma_{\text{tr}}(E) \underset{E \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{8E^2} \iint \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho}{r} \frac{\partial U}{\partial r} dz \right]^2 d^2 \rho. \quad (4)$$

Это выражение не содержит постоянной Планка и совпадает с σ_{tr} для быстрых частиц, $E \gg U$, в классической механике. Такое совпадение связано с тем, что формула (4) остается справедливой и в (квазиклассическом) эйкональном приближении (XIII.18); сравнить со статусом формулы Резерфорда.

13.3. Заменяя в формулах (XII.4,5) $U\Psi_{\mathbf{k}_0}^{+!}$ на $\hat{U}_{\text{обм}}\Psi_{\mathbf{k}_0}^{+}$, $\Psi_{\mathbf{k}_0}^{+}(\mathbf{r})$ на $e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}$ и учтя вид оператора $\hat{U}_{\text{обм}}$, находим

$$f_{\text{обм}}^{\text{B}}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = f_{\text{обм}}^{\text{B}}(\Delta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\Delta\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV, \quad (1)$$

здесь $\Delta = \mathbf{k} + \mathbf{k}_0$, при этом $\Delta^2 = 2k^2(1 + \cos \theta)$. Таким образом,

$$f_{\text{обм}}^{\text{B}}(E, \theta) = f^{\text{B}}(E, \pi - \theta),$$

где $f^{\text{B}}(E, \theta)$ — амплитуда рассеяния обычным центральным потенциалом $U(r)$. Как видно, в случае обменного потенциала рассеяние быстрых частиц, $kR \gg 1$, происходит в основном назад, под углами $\pi - \theta \lesssim (kR)^{-1}$. В связи с рассеянием на обменном потенциале см. также 13.56.

13.4. В условиях задачи рассеивающий потенциал имеет вид

$$U(r) = -e^2 \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{a_{\text{B}}} \right) e^{-2r/a_{\text{B}}},$$

см. 4.6. Согласно формуле (XIII. 8) получаем

$$f^B(q) = \frac{2(8 + q^2 a_B^2)}{(4 + q^2 a_B^2)^2} a_B. \quad (1)$$

Полное сечение упругого рассеяния ($d\Omega = \pi k^{-2} dq^2$):

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \int_0^{4k^2} (f^B)^2 dq^2 = \frac{4\pi}{k^2} \left[\frac{7}{12} - \frac{7 + 9k^2 a_B^2 + 3k^4 a_B^4}{12(1 + k^2 a_B^2)^3} \right] \approx \frac{7\pi a_B^2}{3(ka_B)^2}, \quad (2)$$

здесь учтено, что условие применимости борновского приближения (XIII. 7) принимает вид $ka_B \gg 1$. Несколько иной способ расчета сечения, связанный с вычислением формфактора, см. в следующей задаче. В связи с данной задачей см. также 13.77 и 13.78.

13.5. В приближении задачи 11.6 средняя плотность электронов в основном состоянии атома гелия $n = \frac{2}{\pi a^3} e^{-2r/a}$, где $a = a_B/Z_{\text{эф}} = 16a_B/27$. Вычислив формфактор

$$F(q) = \int n(r) e^{-iqr} dV = \frac{2}{\pi a^3} \int e^{-2r/a - iqr} dV = \frac{32}{(4 + q^2 a^2)^2}$$

и воспользовавшись известной формулой [1, § 139]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4[Z - F(q)]^2}{q^4 a_B^2},$$

находим дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния электрона атомом гелия:

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \int_0^{4k^2} \frac{d\sigma}{d\Omega} dq^2 = \frac{4\pi a^2}{k^2 a_B^2} \frac{7k^6 a^6 + 18k^4 a^4 + 12k^2 a^2}{(1 + k^2 a^2)^3} \approx \frac{28\pi a^2}{3(ka_B)^2}$$

($ka_B \gg 1$; полное сечение отличается от сечения рассеяния атомом водорода множителем $4(16/27)^2 \approx 1,40$).

13.6. Взаимодействие рассеиваемого электрона с нейтральным атомом в приближении Томаса — Ферми и в пренебрежении поляризацией атома имеет вид

$$U(r) = -\varphi(r) = -\frac{Z}{r} \chi(rZ^{1/3}/b),$$

где $\chi(x)$ — универсальная функция модели Томаса — Ферми, см. (XI. 3) (используем атомную систему единиц $e = \hbar = m_e = 1$).

Амплитуда рассеяния в борновском приближении описывается выражением

$$f^B(Z, q) = -2 \int_0^{\infty} U(r) \frac{\sin qr}{q} r dr = Z^{1/3} \Phi(q/Z^{1/3}), \quad (1)$$

где новая универсальная (одинаковая для всех атомов) функция $\Phi(x)$ равна

$$\Phi(x) = \frac{2}{x} \int_0^{\infty} \chi\left(\frac{y}{b}\right) \sin(xy) dy. \quad (2)$$

Отметим, что при $x \rightarrow \infty$ в интеграле (2) существенная область лишь малых y вблизи нижнего предела. Учитывая при этом, что

$\chi(0) = 1$ и $\int_0^{\infty} \sin y dy = 1$ (для вычисления интеграла следует

ввести «обрезающий» множитель $e^{-\alpha y}$ с $\alpha > 0$ и в окончательном выражении положить $\alpha = 0$), находим $\Phi(x) \approx 2/x^2$ при $x \rightarrow \infty$. Соответственно при $q \gg Z^{1/3}$ согласно (1) имеем $f^B \approx 2Z/q^2$, что, как и следовало ожидать, описывает амплитуду резерфордского рассеяния электрона на атомном ядре, так как при больших переданных импульсах несущественно экранирующее действие атомных электронов. При $x \rightarrow 0$ функция $\Phi(x)$ принимает конечное значение.

Формулы (1), (2) определяют дифференциальное сечение упругого рассеяния; при этом полное сечение рассеяния

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \int_0^{4k^2} (f^B(q))^2 dq^2 \approx \frac{\pi Z^{2/3}}{k^2} \int_0^{\infty} \Phi^2(q/Z^{1/3}) dq^2 = \pi C \frac{Z^{4/3}}{k^2},$$

где $C = 7,14$ [22].

13.7. Амплитуда рассеяния на двух центрах

$$f_{2ц}^B(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-iqr} [U_0(r) + U_0(|r-a|)] dV = \\ = f_0^B(q) [1 + e^{-iqa}], \quad (1)$$

а дифференциальное сечение рассеяния

$$d\sigma_{2ц} = 2(1 + \cos qa) (f_0^B(q))^2 d\Omega, \quad (2)$$

Возможность применения соотношений (1), (2) к рассеянию быстрых электронов двухатомной молекулой (при этом f_0^B описывает рассеяние на изолированном атоме) связана с тем, что

при образовании молекулы существенно изменяются состояния лишь внешних, валентных электронов атомов. Поэтому в случае не слишком легких атомов их взаимодействие с налетающим электроном при этом существенно не изменяется и потенциал имеет приведенный в условии задачи вид, где теперь a определяет расстояние между ядрами молекулы. Выражение (2) следует усреднить по возможным положениям вектора \mathbf{a} . Так как амплитуда колебаний ядер мала, см. 11.25, то $|\mathbf{a}| \approx \text{const}$ и все сводится к усреднению по ориентациям \mathbf{a} . Для изотропного распределения, $d\omega = d\Omega_n/4\pi$ (здесь $d\Omega_n$ — элемент телесного угла, заключающий направления вектора $\mathbf{a} = a\mathbf{n}$), находим

$$\overline{\cos qa} = \frac{1}{4\pi} \int \cos qa \, d\Omega_n = \frac{\sin qa}{qa}$$

(для вычисления интеграла удобно направить полярную ось вдоль вектора \mathbf{q}) и соответственно получаем

$$\frac{d\sigma_{\text{мол}}}{d\Omega} = 2 \left(1 + \frac{\sin qa}{qa} \right) \frac{d\sigma_{\text{ат}}}{d\Omega}.$$

Как видно, соотношение между «атомным» и «молекулярным» сечениями непосредственно определяется межъядерным расстоянием a (подобные соотношения возникают и в случае многоатомных молекул, причем и с различными атомами; они лежат в основе дифракционных методов исследования молекулярных структур).

Обсудим связь между полными сечениями рассеяния. В случае $ka \ll 1$ также и $qa \ll 1$, при этом $f_{2\alpha}^B \approx 2f_0^B$ и сечение рассеяния на двух центрах в *четыре раза* больше одноцентрового. В случае $kR \leq 1$ и $a \gg R$ имеем $ka \gg 1$, и поэтому величина qa заметно изменяется уже при небольшом изменении угла рассеяния. Соответственно при интегрировании по углам выражения (2) слагаемое с быстро осциллирующим множителем $\cos qa$ даст вклад, много меньший вклада первого слагаемого, так что в этом случае сечение рассеяния на двух центрах больше одноцентрового в *два раза*.

13.8. В борновском приближении амплитуда рассеяния описывается выражением (сравнить с предыдущей задачей)

$$f_N^B(\mathbf{q}) = f_0^B(q) G_N(\mathbf{q}), \quad G_N(\mathbf{q}) = \sum_n e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}_n}. \quad (1)$$

Подчеркнем, что множитель $G_N(\mathbf{q})$ зависит только от взаимного расположения центров и вектора \mathbf{q} (но не от вида взаимодействия частицы с отдельным центром).

В случае упорядоченного расположения рассеивающих центров вдоль прямой с ортом \mathbf{j} имеем $\mathbf{a}_n = b(n-1)\mathbf{j}$; при этом

$$G_N = \sum_{n=1}^N \exp[-ib(n-1)\mathbf{qj}] = \frac{1 - \exp(-ibN\mathbf{qj})}{1 - \exp(-ib\mathbf{qj})},$$

$$|G_N(\mathbf{q})|^2 = \left[\frac{\sin(bN\mathbf{qj}/2)}{\sin(b\mathbf{qj}/2)} \right]^2. \quad (2)$$

В случае $N \gg 1$ величина $|G_N(\mathbf{q})|^2$ особенно велика при выделенных значениях $\mathbf{q} = \mathbf{q}_s$ таких, что ¹⁾ $b\mathbf{q}_s\mathbf{j} = 2\pi s$, где $s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Поэтому частицы рассеиваются в основном лишь в определенных направлениях, для которых

$$\cos \beta_s \approx k_{0j}/k_0 + 2\pi s/bk_0,$$

где β_s — угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{j} (заметим, что $\mathbf{qj} = \mathbf{kj} - k_{0j}$). В точках максимума $|G_N|^2 = N^2$. Максимумы очень резкие: их ширина $\Delta\beta_s \propto 1/\sqrt{N}$. Сечение рассеяния в такой интервал углов $\propto N$. Для остальных углов рассеяния $|G_N|^2 \sim 1$.

Отмеченные результаты могут быть наглядно получены на основе следующего преобразования выражения для $|G_N|^2$ при $N \gg 1$. Имея в виду соотношение (см. [1, § 42])

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha N}{\pi \alpha^2 N} = \delta(\alpha)$$

и разлагая $\sin(b\mathbf{qj}/2)$ в выражении (2) в окрестности векторов \mathbf{q}_s , находим

$$|G_N(\mathbf{q})|^2 \approx \frac{2\pi N}{b} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \delta\left(\mathbf{kj} - k_{0j} - \frac{2\pi s}{b}\right). \quad (3)$$

Такой подход допускает простое обобщение и на случай «кристаллического» расположения рассеивающих центров. В частности, для системы центров $\mathbf{a}_{\{n\}} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$ с $n_a = 0, 1, \dots, N_a - 1$, имеем ²⁾

$$|G_N(\mathbf{q})|^2 = \left| \sum_{\{n\}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{a}_{\{n\}}) \right|^2 = \frac{(2\pi)^3 N}{b_1 b_2 b_3} \sum_{\tau} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 - 2\pi\boldsymbol{\tau}), \quad (4)$$

¹⁾ Ограничение на $|s|_{\max}$ определяется импульсом рассеиваемых частиц. В случае $k < \pi/b$ возможно только значение $s = 0$; при этом $q = 0$, так что когерентное рассеяние отсутствует.

²⁾ При этом использовано соотношение

$$\prod_{a=1}^3 \delta(\mathbf{q}\mathbf{b}_a - 2\pi s_a) = \frac{1}{b_1 b_2 b_3} \delta(\mathbf{q} - 2\pi\boldsymbol{\tau}).$$

где $N = N_1 N_2 N_3$ — общее число рассеивающих центров,

$$\tau = s_1 a_1 + s_2 a_2 + s_3 a_3, \quad s_a = 0, \pm 1, \dots,$$

$$a_1 = \frac{1}{\Delta} [b_2 b_3], \quad a_2 = \frac{1}{\Delta} [b_3 b_1], \quad a_3 = \frac{1}{\Delta} [b_1 b_2], \quad \Delta = (b_1 [b_2 b_3])$$

(при этом $a_1 b_1 = a_2 b_2 = a_3 b_3 = 1$).

Фигурирующие в выражении (4) δ -функционные слагаемые определяют направления, $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + 2\pi\tau$, упругого рассеяния частицы в кристаллах (*условие Вульфа — Брэгга*).

13.9. В условиях задачи потенциал взаимодействия частиц определяется известной формулой электростатики

$$U(r) = \iint \frac{\rho_1(r'_1) \rho_2(r'_2)}{|\mathbf{r} + \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2|} dV'_1 dV'_2,$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, а $\mathbf{r}_{1,2}$ — радиусы-векторы центров масс сталкивающихся частиц. Имея в виду соотношение

$$\int \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV}{|\mathbf{r} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{4\pi}{q^2} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)},$$

согласно формуле (XIII.6) получаем

$$f^B(q) = -\frac{2m}{\hbar^2 q^2} F_1(q) F_2(q)$$

(m — приведенная масса частиц), здесь

$$F_{1,2}(q) = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \rho_{1,2}(r) dV$$

являются формфакторами соответствующих распределений электрического заряда. При $q = 0$ имеем $F_{1,2}(0) = e_{1,2}$ — заряды частиц. Ряд свойств формфакторов составных частиц рассмотрен в задачах 13.80 и 13.84.

13.10. Подставив в формулу (XIII.5) выражение (XIII.4) и воспользовавшись импульсным представлением для функции Грина свободной частицы

$$\frac{e^{i\mathbf{k}_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{x}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d^3\mathbf{x}}{\mathbf{x}^2 - k_0^2 - i\varepsilon}$$

($\varepsilon > 0$, $\varepsilon \rightarrow 0$), приходим к уравнению Липпмана — Швингера

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left[\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) + \int \frac{\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{x}) f(\mathbf{x}, \mathbf{k}_0)}{2\pi^2 (\mathbf{x}^2 - k_0^2 - i\varepsilon)} d^3\mathbf{x} \right]. \quad (1)$$

Подчеркнем, что для реального упругого рассеяния $k^2 = k_0^2 = 2mE/\hbar^2$. Уравнение же (1) связывает амплитуды и при значе-

ниях $k^2 \neq k_0^2$ (как говорят в таких случаях: вне энергетической поверхности; «выход» с энергетической поверхности осуществляется согласно формуле (XIII. 5)).

С помощью уравнения (1) легко установить рекуррентное соотношение для членов разложения, $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = \sum_n f^{(n)}$, амплитуды по степеням кратности взаимодействия и получить для них явные выражения ($\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$):

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = f^B(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{q}), \quad \tilde{U}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV;$$

$$f^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) =$$

$$= \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^n \int \dots \int \tilde{U}(\mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa}_{n-1}) \frac{\tilde{U}(\boldsymbol{\kappa}_{n-1} - \boldsymbol{\kappa}_{n-2}) d^3\boldsymbol{\kappa}_{n-1}}{2\pi^2(\boldsymbol{\kappa}_{n-1}^2 - k_0^2 - i\varepsilon)} \dots$$

$$\dots \frac{\tilde{U}(\boldsymbol{\kappa}_1 - \mathbf{k}_0) d^3\boldsymbol{\kappa}_1}{2\pi^2(\boldsymbol{\kappa}_1^2 - k_0^2 - i\varepsilon)}$$

(о приложениях полученных результатов см. 13.15 и 13.50).

13.11. Борновское приближение является первым, линейным членом разложения амплитуды рассеяния в ряд по степеням кратности взаимодействия (точнее, по одному из параметров, приведенных в (XIII. 7)). Подобное разложение для сечения рассеяния начинается с членов второго порядка малости, так как $\sigma \propto |f|^2$. Поэтому в соотношении $4\pi \operatorname{Im} f(E, 0) = k\sigma(E)$ в левой части, как и в правой, не должно быть линейного по потенциалу слагаемого. Отсюда с необходимостью следует, что $\operatorname{Im} f^B(\theta = 0) = 0$.

Во втором порядке теории возмущений амплитуда рассеяния описывается выражением (2) из предыдущей задачи. В частности, для рассеяния вперед ($\theta = 0, \mathbf{k} = \mathbf{k}_0$) оно дает

$$f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0) = \frac{m^2}{8\pi^4\hbar^4} \int \frac{|\tilde{U}(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_0)|^2}{\boldsymbol{\kappa}^2 - k_0^2 - i\varepsilon} d^3\boldsymbol{\kappa} \quad (1)$$

(здесь учтено, что $\tilde{U}(\mathbf{q}) = \tilde{U}^*(-\mathbf{q})$). Отсюда следует

$$\operatorname{Im} f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0) = \frac{m^2}{8\pi^4\hbar^4} \int \frac{\varepsilon}{(\boldsymbol{\kappa}^2 - k_0^2)^2 + \varepsilon^2} |\tilde{U}(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_0)|^2 d^3\boldsymbol{\kappa}. \quad (2)$$

Замечая, что $\varepsilon/\pi(x^2 + \varepsilon^2) = \delta(x)$ (при бесконечно малом $\varepsilon > > 0$), и записав $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\kappa}_n$, $d^3\boldsymbol{\kappa} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa} d\boldsymbol{\kappa}^2 d\Omega_n$, выражение (2)

³) Действительно, эта функция отлична от нуля лишь при $|\boldsymbol{\kappa}| \leq \sqrt{\varepsilon} \rightarrow 0$, а интеграл от нее в бесконечных пределах равен единице, как и требуется для δ -функции.

легко преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0) &= \frac{m^2}{16\pi^3 \hbar^4} \iint |\tilde{U}(\mathbf{x}\mathbf{n} - \mathbf{k}_0)|^2 \kappa \delta(\kappa^2 - k_0^2) d\kappa^2 d\Omega_n = \\ &= \frac{m^2 k_0}{16\pi^3 \hbar^4} \int |\tilde{U}(k_0 \mathbf{n} - \mathbf{k}_0)|^2 d\Omega_n \equiv \frac{k_0}{4\pi} \int |f^B(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 d\Omega_n, \end{aligned}$$

или $\operatorname{Im} f^{(2)}(E, \theta = 0) = k\sigma_B(E)/4\pi$, что отражает оптическую теорему во втором порядке теории возмущений.

13.12. Для потенциала Юкавы

$$f^{(1)}(q) \equiv f^B(q) = -\frac{2m\alpha R^2}{\hbar^2(1 + q^2 R^2)}, \quad q = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 \quad (1)$$

и согласно формуле (2) из 13.10 во втором порядке теории возмущений имеем

$$\begin{aligned} f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) &= \\ &= \frac{2m^2 \alpha^2 R^4}{\pi^2 \hbar^4} \int \frac{d^3 \kappa}{[1 + R^2(k_0 - \kappa)^2][1 + R^2(\mathbf{k} - \kappa)^2](\kappa^2 - k_0^2 - i\epsilon)}. \end{aligned} \quad (2)$$

Воспользовавшись здесь соотношением ($k^2 = k_0^2$)

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 + R^2(k_0 - \kappa)^2} \cdot \frac{1}{1 + R^2(\mathbf{k} - \kappa)^2} &= \\ &= \int_0^1 \frac{d\xi}{\{1 + k^2 R^2 + \kappa^2 R^2 - 2R^2 \kappa [k_0 \xi + (1 - \xi) \mathbf{k}]\}^2}, \end{aligned}$$

в выражении (2) легко выполнить интегрирование по углам ($d^3 \kappa = \kappa^2 d\kappa d\Omega$) и получить

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = \frac{4m^2 \alpha^2 R^4}{\pi \hbar^4} \int_0^1 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\kappa^2}{\kappa^2 - k^2 - i\epsilon} K(k, q, \kappa, \xi) d\kappa d\xi, \quad (3)$$

где

$$K = \{(1 + k^2 R^2 + \kappa^2 R^2)^2 - 4\kappa^2 R^4 [k^2 - \xi(1 - \xi)q^2]\}^{-1} \quad (4)$$

и, с учетом четности подынтегральной функции, интегрирование по переменной κ распространено на всю ось.

Выражение (4) для K удобно преобразовать к виду

$$K = \frac{1}{(\kappa R - \alpha_1)(\kappa R - \alpha_2)(\kappa R - \alpha_3)(\kappa R - \alpha_4)}.$$

Эта функция, рассматриваемая как функция комплексного переменного κ , является (как и подынтегральное выражение в фор-

муле (3) в целом) мероморфной и имеет только простые полюсы в точках $\kappa_n = \alpha_n/R$; при этом

$$\alpha_1 \equiv \alpha = \sqrt{k^2 R^2 - \xi(1-\xi)q^2 R^2} + i\sqrt{1 + \xi(1-\xi)q^2 R^2}$$

(так как $0 \leq \xi \leq 1$ и $q^2 \leq 4k^2$, то оба радикала здесь вещественны и положительны) и $\alpha_2 = \alpha^*$, $\alpha_3 = -\alpha$, $\alpha_4 = -\alpha^*$.

Теперь в выражении (3) легко выполнить интегрирование по κ с помощью вычетов, замыкая контур интегрирования в верхнюю полуплоскость комплексного переменного κ . Расположение

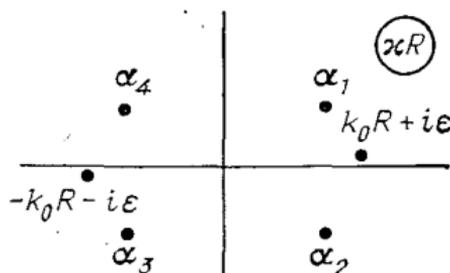


Рис. 47

полюсов показано на рис. 47. Вклад в интеграл выражения (3) от полюса в точке $\kappa = k + i\epsilon$ составляет

$$I_1(\xi) = \frac{i\pi k}{1 + 4k^2 R^2 + 4k^2 q^2 R^4 \xi(1-\xi)}$$

Эта часть интеграла — чисто мнимая. Суммарный же вклад полюсов, расположенных в точках $\kappa = \alpha_1/R$ и $\kappa = \alpha_4/R$, является вещественным и равен

$$I_2(\xi) = \frac{\pi}{2R\sqrt{1 + q^2 R^2 \xi(1-\xi)} [1 + 4k^2 R^2 (1 + q^2 R^2 \xi(1-\xi))]}$$

Наконец, выполняя интегрирование по переменной ξ в формуле

$$f^{(2)}(k, k_0) = \frac{4m^2 \alpha^2 R^4}{\pi \hbar^4} \int_0^1 [I_1(\xi) + I_2(\xi)] d\xi,$$

приходим к окончательному выражению для амплитуды рассеяния на потенциале Юкавы во втором порядке теории возмущений:

$$f^{(2)}(k, k_0) = \frac{2m^2 \alpha^2 R^3}{\hbar^4} \left\{ \frac{2 \operatorname{arctg}(qR/2 \sqrt{\Delta(k, q)})}{qR \sqrt{\Delta(k, q)}} + \frac{i}{qR \sqrt{\Delta(k, R)}} \ln \frac{\sqrt{\Delta(k, q)} + kqR^2}{\sqrt{\Delta(k, q)} - kqR^2} \right\}, \quad (5)$$

где

$$\Delta(k, q) = 1 + k^2 R^2 (4 + q^2 R^2).$$

Обсудим некоторые следствия полученных результатов. Прежде всего отметим, что, вычислив мнимую часть амплитуды второго порядка теории возмущений при $\theta = 0$ (при этом также и $q = 0$) и воспользовавшись оптической теоремой (XIII.11), можно найти полное сечение рассеяния в борновском приближении. Получающийся результат совпадает, естественно, с вычислением сечения по формуле $\sigma_B = \int (f^B)^2 d\Omega$, см. 13.1a).

Интересно сравнить $\text{Im } f^{(2)}$ и $\text{Re } f^{(2)}$ друг с другом и с амплитудой первого приближения при различных значениях энергии и угла рассеяния. В случае медленных частиц, когда $kR \ll 1$, согласно выражениям (5) и (1) получаем

$$\text{Im } f^{(2)}/\text{Re } f^{(2)} \approx 2kR \ll 1, \quad f^{(2)}/f^{(1)} \approx m\alpha R/\hbar^2.$$

Имея в виду оптическую теорему, можно заключить, что малость отношения $\text{Im } f^{(2)}/\text{Re } f^{(2)}$ является общим результатом для достаточно произвольных короткодействующих потенциалов. Малость же отношения $f^{(2)}/f^{(1)}$ предполагает выполнение условия $m\alpha R/\hbar^2 \ll 1$, обеспечивающего применимость борновского приближения, см. (XIII.7) (для потенциала Юкавы $U_0 \sim \alpha/R$). Приведенные оценки сохраняются и для частиц «умеренной» энергии, $kR \sim 1$; теперь $\text{Im } f^{(2)}$ и $\text{Re } f^{(2)}$ являются величинами одного порядка при произвольном угле рассеяния.

Рассмотрим случай быстрых частиц, $kR \gg 1$. При малых углах рассеяния, когда $qR \leq 1$ (эта область вносит доминирующий вклад в полное сечение рассеяния), находим

$$\text{Im } f^{(2)}/\text{Re } f^{(2)} \sim kR \gg 1, \quad |f^{(2)}/f^{(1)}| \sim m\alpha/\hbar^2 k.$$

Малость $\text{Re } f^{(2)}$ по сравнению с $\text{Im } f^{(2)}$ является общим результатом (см. 13.14) а условие $|f^{(2)}/f^{(1)}| \ll 1$, как и следовало ожидать, предполагает выполнение условия применимости борновского приближения для быстрых частиц — второго из условий (XIII.7). Приведенные оценки сохраняются и при увеличении значения qR (при этом проявляются характерные для юкавского потенциала, как потенциала со степенным убыванием $\tilde{U}(q)$ при $q \rightarrow \infty$, закономерности; сравнить с результатом следующей задачи).

13.13. Фурье-компонента потенциала

$$\tilde{U}(q) = \int U_0 \exp\left(-iqr - \frac{r^2}{R^2}\right) dV = \pi^{3/2} U_0 R^3 e^{-q^2 R^2/4}$$

и согласно формуле (2) из 13.10 амплитуда рассеяния во втором порядке теории возмущений описывается выражением

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = \frac{m^2}{8\pi^4 \hbar^4} \int \frac{\tilde{U}(\mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa}) \tilde{U}(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_0)}{\boldsymbol{\kappa}^2 - k_0^2 - i\epsilon} d^3\boldsymbol{\kappa} =$$

$$= \frac{m^2 U_0^2 R^6}{8\pi \hbar^4} e^{-q^2 R^2 / 8} \int \frac{\exp\left\{-\frac{1}{2} R^2 \left[\boldsymbol{\kappa} - \frac{1}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)\right]^2\right\}}{\boldsymbol{\kappa}^2 - k_0^2 - i\epsilon} d^3\boldsymbol{\kappa}. \quad (1)$$

Доминирующую роль в интеграле играет область значений $\boldsymbol{\kappa}$, в которой $|\boldsymbol{\kappa} - (\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)/2| R \leq 1$ (вне этой области подынтегральная функция экспоненциально мала). При высоких энергиях, $kR \gg 1$, и больших переданных импульсах, $qR \gg 1$, в этой области знаменатель подынтегральной функции в выражении (1) изменяется незначительно и его можно вынести за знак интеграла в точке $\boldsymbol{\kappa} = (\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)/2$. После этого простое интегрирование дает ($k^2 = k_0^2$):

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) \approx \text{Re } f^{(2)} \approx -\frac{\sqrt{2\pi} m^2 U_0^2 R^3}{\hbar^4 q^2} \exp\left(-\frac{1}{8} q^2 R^2\right). \quad (2)$$

В этом приближении амплитуда $f^{(2)}$ — вещественная функция. Ее мнимую часть согласно (1) легко найти в общем случае, если заметить, что

$$\text{Im} \frac{1}{\boldsymbol{\kappa}^2 - k_0^2 - i\epsilon} = \pi \delta(\boldsymbol{\kappa}^2 - k_0^2)$$

(сравнить с 13.11). Записав $d^3\boldsymbol{\kappa} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa} d\boldsymbol{\kappa}^2 d\Omega$ и интегрируя сначала по $\boldsymbol{\kappa}^2$, а затем по углам (выбрав полярную ось вдоль вектора $\mathbf{k} + \mathbf{k}_0$), находим

$$\text{Im } f^{(2)} = \left(\frac{m U_0 R^3}{4\hbar^2}\right)^2 \iint \boldsymbol{\kappa} \delta(\boldsymbol{\kappa}^2 - k^2) \times$$

$$\times \exp\left[-\boldsymbol{\kappa}^2 R^2 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_0) R^2\right] d\boldsymbol{\kappa}^2 d\Omega =$$

$$= \frac{\pi m^2 U_0^2 R^4}{2\hbar^4 |\mathbf{k} + \mathbf{k}_0|} \text{sh}\left(\frac{1}{2} |\mathbf{k} + \mathbf{k}_0| k R^2\right) e^{-k^2 R^2} \quad (3)$$

(заметим, что $|\mathbf{k} + \mathbf{k}_0| = (4k^2 - q^2)^{1/2}$).

При больших энергиях, $kR \gg 1$, и малых углах рассеяния, когда $qR \leq 1$, амплитуда второго порядка определяется в основном мнимой частью (3), как это следует из 13.14 (формула (2) при $qR \leq 1$ неприменима). При больших же изменениях

импульса, наоборот, доминирующей является вещественная часть амплитуды $f^{(2)}$. Более того, так как

$$\operatorname{Re} f^{(2)} \propto e^{-q^2 R^2/8}, \text{ а } f^{(1)} = f^B \propto \tilde{U}(q) \propto e^{-q^2 R^2/4},$$

то при достаточно больших значениях qR будет $|\operatorname{Re} f^{(2)}| \gg \gg |f^B|$, что указывает на неприменимость борновского приближения независимо от величины параметра U_0 , характеризующего силу взаимодействия⁴). Подчеркнем, что отмеченные закономерности характерны для потенциалов с экспоненциальным убыванием фурье-компоненты $\tilde{U}(q) \propto \exp(-\alpha q^n)$ с $n \geq 1$ при $q \rightarrow \infty$ (сравнить с 8.29, а также со случаем степенного убывания $\tilde{U}(q)$, рассмотренным в предыдущей задаче).

В заключение отметим, что с помощью формулы (3) и оптической теоремы (XIII.11) можно найти сечение рассеяния в борновском приближении; результат, естественно, совпадает с вычислением его по формуле $\sigma_B = \int (f^B)^2 d\Omega$, см. 13.1e).

13.14. Во втором порядке теории возмущений амплитуда рассеяния описывается выражением

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = \frac{m^2}{8\pi^4 \hbar^4} \int \frac{\tilde{U}(\mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa}) \tilde{U}(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_0)}{\kappa^2 - k_0^2 - i\epsilon} d^3\boldsymbol{\kappa} \quad (1)$$

(см. 13.10). При большой энергии, $kR \gg 1$, и малом угле рассеяния, когда $qR \leq 1$, как видно из (1), вектор $\boldsymbol{\kappa}$, как и \mathbf{k} , «близок» к \mathbf{k}_0 . Запишем эти векторы в виде

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{q} = k_{\parallel} \mathbf{n}_0 + \mathbf{q}_{\perp}, \quad \boldsymbol{\kappa} = \kappa_{\parallel} \mathbf{n}_0 + \boldsymbol{\kappa}_{\perp},$$

где $\mathbf{n}_0 = \mathbf{k}_0/k_0$, а $\mathbf{q}_{\perp}, \boldsymbol{\kappa}_{\perp} \perp \mathbf{n}_0$. При этом $|\mathbf{q}_{\perp}| \approx q$ и $k_{\parallel} = k_0 + q_{\parallel}$, $q_{\parallel} \approx -q^2/2k_0$, сравнить с 13.2. После подстановки явных выражений для фурье-компонент потенциала (через $U(\mathbf{r})$) интеграл в (1) принимает вид

$$\int \frac{U(\rho_1, z_1) U(\rho_2, z_2) \exp\{-i[\boldsymbol{\kappa}'_{\parallel}(z_1 - z_2) + \boldsymbol{\kappa}_{\perp}(\rho_1 - \rho_2) + \mathbf{q}_{\perp}\rho_2]\}}{2k_0 \boldsymbol{\kappa}'_{\parallel} + (\boldsymbol{\kappa}'_{\parallel})^2 + \boldsymbol{\kappa}_{\perp}^2 - i\epsilon} \times \\ \times d^3 r_1 d^3 r_2 d\boldsymbol{\kappa}'_{\parallel} d^2 \boldsymbol{\kappa}_{\perp}. \quad (2)$$

Здесь $\boldsymbol{\kappa}'_{\parallel} = \boldsymbol{\kappa}_{\parallel} - k_0$ и в показателе экспоненты опущено слагаемое $-iq_{\parallel} z_2$, так как $|q_{\parallel} z_2| \leq q^2 R/k_0 \ll 1$. Заметим, что члены ряда теории возмущений для амплитуды рассеяния, см. формулу (2) из 13.10, наглядно можно интерпретировать как описывающие последовательность однократных столкновений частицы с

⁴) Это относится лишь к большим значениям qR (вклад которых в полное сечение рассеяния мал).

внешним полем, в каждом из которых происходит соответствующее изменение импульса частицы. В этом смысле радиус-вектор \mathbf{r}_1 в приведенном интеграле соответствует точке первого столкновения, после которого импульс частицы \mathbf{k}_0 становится равным \mathbf{k} (после второго столкновения он принимает конечное значение \mathbf{k}). •

Замыканием контура в верхнюю полуплоскость комплексной переменной κ'_\parallel в случае $z_2 > z_1$ и в нижнюю полуплоскость при $z_2 < z_1$ в выражении (2) можно выполнить интегрирование по κ'_\parallel :

$$\int \frac{\exp[-i\kappa'_\parallel(z_1 - z_2)] d\kappa'_\parallel}{2k_0\kappa'_\parallel + (\kappa'_\parallel)^2 + \kappa_\perp^2 - i\varepsilon} = \begin{cases} \frac{i\pi}{k_0} \exp\left[\frac{i\kappa_\perp^2}{2k_0}(z_1 - z_2)\right], & z_2 > z_1, \\ \frac{i\pi}{k_0} \exp[2ik_0(z_1 - z_2)], & z_2 < z_1. \end{cases} \quad (3)$$

Показатели возникающих экспоненциальных сомножителей здесь имеют существенно различные значения. Так как $|k_0 z_{1,2}| \sim \sim k_0 R \gg 1$, то в случае $z_1 > z_2$ экспонента в (3) является быстро осциллирующей функцией. Это означает, что при последующем интегрировании по $z_{1,2}$ в выражении (2) вклад таких $z_{1,2}$ будет малым и им можно пренебречь. Соответственно выражение (3) можно считать равным

$$\frac{i\pi}{k_0} \eta(z_2 - z_1) \exp\left[i \frac{\kappa_\perp^2(z_1 - z_2)}{2k_0}\right], \quad (4)$$

где $\eta(z)$ — ступенчатая функция⁵⁾, а так как характерные значения $z_{1,2} \leq R$ и $\kappa_\perp \leq R^{-1}$, то экспоненту вообще можно заметить на 1. Появление в выражении (4) ступенчатой функции допускает наглядное объяснение: для быстрых частиц каждое последующее «столкновение» происходит при все больших значениях z (нет рассеяния назад).

Теперь в выражении (2) легко выполняется интегрирование по κ_\perp , а возникающая при этом δ -функция $\delta(\rho_1 - \rho_2)$ позволяет проинтегрировать и по ρ_2 . В результате получаем

$$f^{(2)} = i \frac{m^2}{2\pi\hbar^4 k_0} \int \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} U(\rho, z_1) dz_1 \int_{z_1}^{\infty} U(\rho, z_2) dz_2 \right\} e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \rho} d^2\rho.$$

Наконец, заменяя здесь нижний предел интегрирования по z_2 на $-\infty$ и вводя при этом коэффициент 1/2, приходим к приведен-

⁵⁾ Напомним, что $\eta(z) = 1$ для $z > 0$ и $\eta(z) = 0$ для $z < 0$.

ному в условии задачи выражению. Отметим, что для центрального потенциала оно является чисто мнимым (вещественная часть амплитуды $f^{(2)}$ много меньше мнимой и в рассматриваемом приближении не возникает, сравнить с 13.12 и 13.13).

Применительно к потенциалу $U = U_0 \exp\left(-\frac{r^2}{R^2}\right)$ получаем

$$f^{(2)} = i \frac{\pi m^2 U_0^2 R^4}{8 \hbar^4 k_0} e^{-q^2 R^2/8},$$

что совпадает с формулой (3) из 13.13 для значений $qR \ll 1$.

В заключение заметим, что, положив $q = 0$ в формуле для $f^{(2)}$ и воспользовавшись оптической теоремой (XIII.11), получаем выражение, определяющее в борновском приближении полное сечение рассеяния и совпадающее с результатом 13.2.

13.15. Уравнение Липпмана — Швингера ((1) из 13.10) остается справедливым для достаточно произвольного взаимодействия \hat{U} , если заменить фурье-компоненту потенциала $\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ на ядро $\tilde{U}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ оператора \hat{U} в импульсном представлении. Для сепарабельного потенциала

$$\tilde{U}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \lambda g(k) g^*(k'), \quad g(k) = \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \chi(r) dV$$

и уравнение Липпмана — Швингера принимает вид

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -\frac{\lambda m}{2\pi \hbar^2} g(k) \left[g^*(k_0) + \int \frac{g^*(\boldsymbol{\kappa}) f(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{k}_0) d^3\boldsymbol{\kappa}}{2\pi^2 (\boldsymbol{\kappa}^2 - k_0^2 - i\varepsilon)} \right]. \quad (1)$$

Обозначив фигурирующий здесь интеграл через $F(k_0)$, имеем

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -\frac{\lambda m}{2\pi \hbar^2} g(k) [g^*(k_0) + F(k_0)]$$

и после подстановки этого выражения в указанный интеграл находим $F(k_0)$ и амплитуду рассеяния ($k = k_0$):

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) \equiv f(k) = -\frac{\lambda m}{2\pi \hbar^2} \frac{g^2(k)}{1 + K(k)},$$

где

$$K(k) = \frac{\lambda m}{4\pi^3 \hbar^2} \int \frac{|g(\boldsymbol{\kappa})|^2 d^3\boldsymbol{\kappa}}{\boldsymbol{\kappa}^2 - k^2 - i\varepsilon}.$$

Одним из характерных свойств ее является независимость от угла рассеяния⁶⁾, так что угловое распределение рассеянных частиц оказывается изотропным и полное сечение рассеяния $\sigma(E) =$

⁶⁾ Сравнить с рассеянием на потенциале нулевого радиуса, рассмотренным в 13.20.

$= 4\pi|f|^2$ (поучительно убедиться в совпадении его с результатом вычисления согласно оптической теореме). Отметим также предельный случай больших энергий: $\sigma(E) \propto |g(k)|^4$ при $E \rightarrow \infty$.

13.16. При $E = 0$ имеем

$$f^B(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) dV, \quad f_{\text{точ}}(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) \Psi_0(r) dV, \quad (1)$$

где в. ф. $\Psi_0(r)$ удовлетворяет уравнению (XIII.4)

$$\Psi_0(r) = 1 - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi_0(r') dV'. \quad (2)$$

Если в потенциале $U(r)$ нет связанных состояний частицы, то волновая функция при $E = 0$ не имеет нулей, и так как $\Psi_0(\infty) = 1$, то $\Psi_0(r) > 0$. При этом, как следует из уравнения (2), для потенциала отталкивания $0 \leq \Psi_0(r) \leq 1$ и согласно (1) имеем неравенство $|f^B(0)| > |f_{\text{точ}}(0)|$, т. е. борновское приближение дает завышенное значение сечения рассеяния. Аналогично в случае потенциала притяжения, $U(r) \leq 0$, получаем $|f^B(0)| < < |f_{\text{точ}}(0)|$, так что борновское приближение дает заниженное значение сечения рассеяния (в отсутствие в потенциале связанных состояний). Подчеркнем, что установленные соотношения между сечениями не предполагают малости потенциала, требуемой для применимости борновского приближения. В связи с данной задачей см. также 13.69 и 13.70.

13.17. В первом порядке по магнитному полю взаимодействие имеет вид

$$\hat{V} = -\frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}).$$

Подставляя это выражение в формулу (XIII.5) вместо $U(\mathbf{r})$ и заменяя в. ф. $\Psi_{\mathbf{k}_0}^+$ плоской волной, получаем амплитуду рассеяния

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) &= \frac{e}{4\pi\hbar^2 c} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}} d^3r = \\ &= \frac{e}{4\pi\hbar c} (\mathbf{k} + \mathbf{k}_0) \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{q}), \end{aligned}$$

где $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) dV$ — фурье-компонента векторного потенциала. При калибровочном преобразовании $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ изменяется на $\nabla\chi(\mathbf{r})$, при этом к $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{q})$ добавляется слагаемое $i\mathbf{q}\tilde{\chi}(\mathbf{q})$. Однако так как $\mathbf{q}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_0) = 0$, то значение f , как и величина дифференциального сечения рассеяния, не изменяются в согласии с калибровочной инвариантностью.

$$\frac{\sin qr}{qr} = \frac{\sin \sqrt{2k^2r^2 - 2k^2r^2 \cos \theta}}{\sqrt{2k^2r^2 - 2k^2r^2 \cos \theta}} =$$

$$= \frac{\pi}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [J_{l+1/2}(kr)]^2 P_l(\cos \theta),$$

которое следует из *теоремы сложения* для цилиндрических функций, если заметить, что $(\sin z)/z = J_{1/2}(z) \sqrt{\pi/2z}$. Подставив его в формулу (XIII.8), получаем борновскую амплитуду в виде ряда

$$f^B = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left\{ -\frac{\pi m}{\hbar^2 k} \int_0^{\infty} U(r) [J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr \right\} P_l(\cos \theta). \quad (1)$$

Сравнивая с разложением (XIII.9) амплитуды рассеяния по парциальным волнам, заключаем, что борновское приближение соответствует случаю малых фаз рассеяния⁷⁾, $|\delta_l(k)| \ll 1$, когда

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

Из сопоставления (1) и (2) следует известное выражение (XIII.12) для фазовых сдвигов в борновском приближении, представляющее первый, линейный по потенциалу член разложения $\delta_l(k)$ (сравнить с задачей к § 126 из [1]).

13.19. Записав в. ф. $\Psi_{klm} = u_{kl}(r) Y_{lm}/\sqrt{r}$, имеем для функции $u_{kl}(r)$ уравнение (сравнить с (IV.6))

$$u_{kl}'' + \frac{1}{r} u_{kl}' + \left\{ k^2 - \frac{1}{r^2} \left[\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2ma}{\hbar^2} \right] \right\} u_{kl} = 0.$$

Решение его, удовлетворяющее граничному условию $u(0) = 0$, есть $u_{kl} = C J_\nu(kr)$, где J_ν — функция Бесселя с индексом

$$\nu = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2ma}{\hbar^2}}.$$

⁷⁾ Малость всех фазовых сдвигов является необходимым (но не достаточным!) условием применимости борновского приближения; именно она обеспечивает вещественность амплитуды рассеяния в этом приближении.

По асимптотике решения при $r \rightarrow \infty$

$$u_{kl} \approx C \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin \left[kr - \frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{4} \right] \equiv \\ \equiv C \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin \left[kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right]$$

находим фазовые сдвиги

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2} \left[\sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}} - \left(l + \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (1)$$

Так как δ_l не зависит от k , то согласно формуле (XIII.9) амплитуда рассеяния имеет вид $f(k, \theta) = F(\theta)/k$, а дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega \propto k^{-2} \propto E^{-1}$. Такая же зависимость от энергии⁸⁾ (но не от угла рассеяния!) характерна и для дифференциального сечения рассеяния в классической механике, см. (5).

Рассмотрим некоторые частные случаи, когда удастся (приближенно) выполнить суммирование ряда (XIII.9) с фазовыми сдвигами (1).

а) В случае $m\alpha/\hbar^2 \ll 1$ согласно (1) имеем

$$\delta_l \approx -\frac{\pi m\alpha}{(2l+1)\hbar^2}, \quad \text{при этом } |\delta_l| \ll 1, \quad (2)$$

и, разлагая $e^{2i\delta_l}$ в выражении (XIII.9), получаем⁹⁾

$$f(E, \theta) \approx -\frac{\pi m\alpha}{\hbar^2 k} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) = -\frac{\pi m\alpha}{2\hbar^2 k \sin(\theta/2)}, \quad (3)$$

что совпадает с результатом борновского приближения, см. 13.1z). При этом угловая зависимость дифференциального сечения

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{\pi^2 m\alpha^2}{8\hbar^2 E \sin^2(\theta/2)} \quad (4)$$

имеет мало общего с результатом классической механики [26]

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{кл}} = \frac{\pi^2 \alpha (\pi - \theta)}{E\theta^2 (2\pi - \theta)^2 \sin \theta}. \quad (5)$$

⁸⁾ Для потенциала $U = \alpha/r^2$ зависимость $d\sigma/d\Omega \propto E^{-1}$ как в классической, так и в квантовой механике легко получить из соображений размерности.

⁹⁾ Для суммирования ряда использована производящая функция полиномов Лежандра (с $z = \cos \theta$ и $x = 1$):

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xz+x^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} x^l P_l(z).$$

б) В случае $ma/\hbar^2 \gg 1$ выполнить суммирование ряда по парциальным волнам при произвольном угле рассеяния не удастся. Легко, однако, заметить, что для достаточно малых углов рассеяния сохраняют силу выражения (3) и (4). Это связано с неограниченным возрастанием амплитуды рассеяния при $\theta \rightarrow 0$. Так как каждый член ряда (XIII.9) ограничен, то такая расходимость амплитуды означает, что в сумме существенно много слагаемых с большими значениями l (тем большими, чем меньше угол рассеяния). Но при достаточно больших l по-прежнему справедливо соотношение (2), из которого и вытекают формулы (3), (4). То обстоятельство, что при малых углах рассеяния борновское приближение применимо независимо от величины параметра ma/\hbar^2 , вполне естественно: в условиях данной задачи при этом существенны большие расстояния (ввиду расходимости амплитуды), на которых $U = \alpha/r^2 \ll \hbar v/r$ и потенциал можно рассматривать как возмущение.

в) Рассмотрим рассеяние частиц назад. Так как

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) = 4\delta(1 - \cos \theta),$$

т. е. такая сумма при $\theta \neq 0$ равна нулю (см. [1, § 124]) и $P_l(-1) = (-1)^l$, то ряд (XIII.9) принимает вид

$$f(E, \theta = \pi) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp \left[-i\pi \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2ma}{\hbar^2}} \right]. \quad (6)$$

В случае $ma/\hbar^2 \gg 1$ в этой сумме основную роль играют слагаемые с большими значениями ¹⁰⁾ $l \leq (ma/\hbar^2)^{1/4}$. При этом соседние слагаемые мало отличаются друг от друга и суммирование можно заменить интегрированием:

$$f(E, \pi) \approx \frac{1}{k} \int_0^{\infty} l \exp \left[-i\pi \sqrt{l^2 + \frac{2ma}{\hbar^2}} \right] dl. \quad (7)$$

С помощью подстановки $x = \sqrt{l^2 + 2ma/\hbar^2}$ получаем

$$f(E, \pi) = -i \frac{\sqrt{2ma}}{\pi \hbar k} \exp \left[-i\pi \sqrt{\frac{2ma}{\hbar^2}} \right]. \quad (8)$$

¹⁰⁾ При больших значениях l слагаемые суммы (6) начинают быстро осциллировать и в результате взаимной компенсации их вкладов соответствующая часть суммы оказывается малой. Заметим, что для вычисления ряда (6), как и предшествующей суммы для δ -функции при $\theta \neq 0$, а также и интеграла (7) следует ввести обрезывающий множитель типа $e^{-\gamma l}$ с $\gamma > 0$ и затем в окончательном результате положить $\gamma = 0$.

При этом дифференциальное сечение рассеяния для $\theta = \pi$ совпадает с результатом (5) классической механики. Это замечание справедливо и для области углов рассеяния (расширяющейся с увеличением α), примыкающих к $\theta = \pi$; см. по этому поводу [1, § 127].

Заметим в заключение, что в случае потенциала притяжения, $\alpha < 0$, фазовые сдвиги (1) могут стать комплексными. Формально это соответствует появлению «поглощения» в системе. Причина появления неустойчивости связана с возникновением «падения на центр», см. в связи с этим 9.14. Что же касается рассеяния под малыми углами, то оно описывается формулами (3), (4) независимо от знака α .

13.20. Так как потенциал нулевого радиуса оказывает действие на частицу только с моментом $l = 0$, то отлична от нуля лишь фаза s -рассеяния $\delta_0(k)$, а амплитуда рассеяния не зависит от угла θ . При этом асимптотическая форма волновой функции

$$\Psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{f(E)}{r} e^{ikr} \quad (1)$$

определяет фактически точное решение у. Ш. для всех $r > 0$. Сравнивая при $r \rightarrow 0$ разложение в ф.

$$\Psi_{\mathbf{k}}^+ \approx \frac{f}{r} + (1 + ikf)$$

с граничным условием, задающим потенциал нулевого радиуса, см. 4.10, находим

$$f(E) = -\frac{a_0}{1 + ik a_0}, \quad \sigma = 4\pi |f|^2 = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(E) = \frac{4\pi a_0^2}{1 + k^2 a_0^2}, \quad (2)$$

здесь $a_0 = 1/\alpha_0$; при этом $f(0) = -a_0$, так что a_0 является длиной рассеяния на п. н. р.

Наконец, используя равенство $e^{2i\delta} - 1 = 2i/(\operatorname{ctg} \delta - i)$, получаем для фазы s -рассеяния на п. н. р. соотношение

$$k \operatorname{ctg} \delta_0(k) = -\frac{1}{a_0}. \quad (3)$$

Сравнение его с разложением эффективного радиуса (XIII.15) показывает, что для рассеяния на п. н. р. эффективный радиус взаимодействия $r_0 = 0$.

13.21. Так как по условию $|\delta_0(k)| \ll 1$ при всех энергиях, то потенциал можно рассматривать как возмущение и воспользо-

ваться выражением (XIII. 12) для фазового сдвига s -волны:

$$\delta_0(k) = -\frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^{\infty} U(r) \sin^2 kr \, dr = -\frac{m}{\hbar^2 k} \int_0^{\infty} U(r) [1 - \cos 2kr] \, dr. \quad (1)$$

Умножим обе части равенства (1) на $(-\hbar^2 k/2m)$, а затем продифференцируем по k ; в результате получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dk} [k\delta_0(k)] = \int_0^{\infty} rU(r) \sin 2kr \, dr \equiv \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} rU(|r|) e^{-2ikr} \, dr \quad (2)$$

(здесь использовано *четное* продолжение потенциала, $U(-|r|) \equiv U(|r|)$, на область отрицательных значений r).

Формула (2) определяет фурье-компоненту потенциала (точнее, функции $rU(|r|)$) и позволяет найти сам потенциал с помощью обратного преобразования Фурье:

$$rU(|r|) = \frac{i\hbar^2}{\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ikr} \frac{d}{dk} [k\delta_0(k)] \, dk. \quad (3)$$

Так как согласно (1) $\delta_0(k)$ следует рассматривать как нечетную функцию переменной k и соответственно $\delta_0'(k)$ — как четную функцию, то выражение (3) принимает вид

$$U(r) = -\frac{2\hbar^2}{\pi m r} \int_0^{\infty} \sin(2kr) \frac{d}{dk} [k\delta_0(k)] \, dk. \quad (4)$$

Рассмотрим приложения этой формулы.

а) В случае $\delta_0(k) = \text{const} = C$ (при $k > 0$) согласно (4) получаем

$$U(r) = -\frac{2\hbar^2 C}{\pi m r} \int_0^{\infty} \sin 2kr \, dk = -\frac{\hbar^2 C}{\pi m r^2} \equiv \frac{\gamma}{r^2} \quad (5)$$

(для вычисления интеграла следует ввести «обрезающий» множитель $e^{-\lambda k}$ с $\lambda > 0$ и в окончательном результате положить $\lambda = 0$).

б) Подставляя $[k\delta_0(k)]' = 2\alpha k/(1 + \beta k^2)^2$ в формулу (3) и вычисляя интеграл с помощью вычетов, находим

$$U(r) = -\frac{2\alpha\hbar^2}{m\sqrt{\beta^3}} \exp\left(-\frac{2r}{\sqrt{\beta}}\right) \equiv U_0 e^{-r/R}. \quad (6)$$

Заметим, что условие $|\delta_0(k)| \ll 1$ предполагает, что $|C| \ll 1$ и $|\alpha| \ll \sqrt{\beta}$; при этом найденные потенциалы (5), (6), как и следовало ожидать, удовлетворяют условию применимости, первому из (XIII.7), борновского приближения при любой энергии.

13.22. Так как действие оператора $\hat{U}_{\text{обм}}$ на волновую функцию состояния с определенным значением l момента сводится к умножению ее на $(-1)^l U(r)$, то выражение для фазового сдвига $\delta_{\text{обм}, l}^B(k)$ лишь множителем $(-1)^l$ отличается от борновского выражения (XIII.12) для обычного потенциала $U(r)$.

13.23. Фазовую теорию рассеяния в двумерном случае можно развить в полной аналогии со случаем центрального поля, рассмотренным в [1, § 123]. Имея в виду содержание этого параграфа, укажем изменения, которые следует внести в соответствующие формулы для обобщения их на рассматриваемый случай.

Гамильтониан плоского движения в аксиально симметричном поле имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + U(\rho), \quad (1)$$

а интересующее нас решение уравнения Шрёдингера имеет асимптотику

$$\Psi_{\mathbf{k}}^+(\rho) \approx e^{ik\rho \cos \varphi} + \sqrt{i} \frac{f(k, \varphi)}{\sqrt{\rho}} e^{ik\rho}, \quad \rho \rightarrow \infty \quad (2)$$

(поток частиц падает в направлении оси x , при этом $x = \rho \cos \varphi$). Заметим, что теперь расходящаяся волна — цилиндрическая (а не сферическая), и поэтому вместо $1/r$ появляется $1/\sqrt{\rho}$. Далее, в двумерном случае амплитуда рассеяния $f(k, \varphi)$ имеет размерность корня из длины, а дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\varphi = |f|^2$ — размерность длины. Наконец, фазовый множитель \sqrt{i} введен для удобства.

Так как оператор $\hat{l}_z = -i\partial/\partial\varphi$ коммутирует как с гамильтонианом свободного движения, так и с гамильтонианом (1), то плоскую двумерную волну и точную в.ф. $\Psi_{\mathbf{k}}^+(\rho)$ удобно разложить по с.ф. $\Psi_m = e^{im\varphi}$ этого оператора (аналогично

разложению по шаровым функциям в случае центрального потенциала):

$$e^{ik\rho \cos \varphi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m J_{|m|}(k\rho) e^{im\varphi},$$

$$\Psi_k^+ = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m R_{km}(\rho) e^{im\varphi}. \quad (3)$$

Здесь учтено, что радиальная функция свободного движения с «моментом» m выражается через функцию Бесселя $J_{|m|}(k\rho)$, при этом коэффициенты разложения $A_m = i^{|m|}$, см. [33, с. 987]. Значения коэффициентов B_m определяются из условия, что разность $\Psi_k^+ - e^{ikx}$ содержит на больших расстояниях лишь расходящиеся, $\sim e^{ik\rho}$, волны для каждого члена суммы по m . Записав асимптотику радиальной функции в виде ¹¹⁾

$$R_{km}(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi k\rho}} \sin\left(k\rho - \frac{\pi|m|}{2} + \frac{\pi}{4} + \delta_m\right), \quad (4)$$

находим $B_m = e^{i\delta_m} A_m$. В результате для амплитуды рассеяния получаем искомое разложение по парциальным волнам

$$f(k, \varphi) = \frac{1}{i\sqrt{2\pi k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (e^{2i\delta_m} - 1) e^{im\varphi}. \quad (5)$$

Заметим, что фазовый сдвиг δ_m не зависит от знака m .

Согласно формуле (5) полное сечение рассеяния равно

$$\sigma = \int_0^{2\pi} |f|^2 d\varphi = \frac{4}{k} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sin^2 \delta_m, \quad (6)$$

а оптическая теорема в двумерном случае гласит

$$\text{Im } f(k, \varphi = 0) = \sqrt{\frac{k}{8\pi}} \sigma(E) \quad (7)$$

(при этом существенным является отмеченное выше выделение множителя \sqrt{i} в выражении (2); в борновском приближении для двумерного случая, когда $|\delta_m| \ll 1$, так введенная амплитуда согласно (5) оказывается вещественной).

¹¹⁾ Нормировочный множитель в этой функции и фаза δ_m выбраны таким образом, что при $\delta_m = 0$ асимптотика (4) совпадает с асимптотикой функции Бесселя — радиальной функции свободного движения.

13.24. Гамильтониан поперечного движения заряженной частицы в магнитном поле $\hat{H}_\perp = (\hat{p} - e\mathbf{A}/c)^2/2\mu$, для рассматриваемого случая в полярных координатах принимает вид ¹²⁾

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \left[\lambda^2 + 2i\lambda \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \right\}, \quad (1)$$

где $\lambda = e\Phi_0/2\pi\hbar c$. Так как оператор \hat{H}_\perp коммутирует с l_z , то развитая в предыдущей задаче фазовая теория рассеяния для двумерного случая применима и в данной; теперь, однако, фазовый сдвиг δ_m зависит от знака m . Радиальные функции в рассматриваемой задаче, как и в случае свободного движения, выражаются через функции Бесселя $J_\nu(k\rho)$, но уже с индексом $\nu = |m - \lambda|$. Используя их асимптотику, находим

$$\delta_m = -\frac{\pi}{2} (|m - \lambda| - |m|).$$

При этом амплитуда рассеяния (см. формулу (5) из предыдущей задачи) оказывается равной

$$f(k, \varphi) = \frac{1}{i\sqrt{2\pi k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \{e^{i\pi(m-|m-\lambda|)} - 1\} e^{im\varphi}. \quad (2)$$

Обозначив через m_0 минимальное из значений m , которые еще больше λ , и разбив сумму на две: со значениями $m \geq m_0$ и с $m \leq m_0 - 1$ соответственно, находим значения последних (представляющих суммы геометрических прогрессий), что позволяет получить замкнутые выражения для амплитуды и дифференциального сечения рассеяния:

$$f = i \frac{\exp[i(m_0 - 1/2)\varphi]}{\sqrt{2\pi k}} \frac{\sin \pi\lambda}{\sin(\varphi/2)};$$

$$\frac{d\sigma}{d\varphi} = \frac{\sin^2(e\Phi_0/2\hbar c)}{2\pi k \sin^2(\varphi/2)} \underset{\varphi \rightarrow 0}{\sim} \varphi^{-2}.$$

Интересной особенностью полученного результата является бесконечное значение полного сечения рассеяния, т. е. рассеяние частиц происходит даже при сколь угодно большом прицельном параметре. С точки зрения классической теории это обстоятельство представляется удивительным: магнитное поле и сила Ло-

¹²⁾ Свободное движение вдоль поля не представляет интереса. Отметим, что при расписывании гамильтониана учтен вид азимутальной компоненты градиента: $\nabla_\varphi = \partial/\rho \partial\varphi$.

ренца отличны от нуля лишь на оси и поэтому вообще не оказывают никакого влияния на движение частиц! Дело в том, что этот эффект Ааронова—Бома является чисто квантовым и исчезает при переходе к классической механике: при $\hbar \rightarrow 0$ также $k^{-1} = \hbar/p \rightarrow 0$ и рассеяние действительно отсутствует. В квантовой механике взаимодействие заряженной частицы с магнитным полем характеризуется векторным потенциалом: именно он входит в гамильтониан¹³⁾. В данной задаче, несмотря на то, что вне оси $\mathcal{H} = 0$, векторный потенциал никаким калибровочным преобразованием не может быть обращен в нуль (так как $\oint \mathbf{A} \, d\mathbf{l} = \Phi_0$), а его медленное, $\propto 1/\rho$, убывание на больших расстояниях объясняет бесконечность сечения рассеяния.

13.25. При больших энергиях применимо, вообще говоря, борновское приближение и для фазовых сдвигов можно воспользоваться выражением (XIII.12). В нем при $k \rightarrow \infty$ во всей области интегрирования, исключая узкую область малых значений r , аргумент функции Бесселя $x = kr \gg 1$. Воспользовавшись известной асимптотикой $J_\mu(x)$, получаем

$$\delta_l(k) \underset{k \rightarrow \infty}{=} -\frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty U(r) \sin^2\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) dr \approx$$

$$\approx -\frac{m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty U(r) dr \propto k^{-1} \quad (1)$$

(быстро осциллирующий множитель $\sin^2(x - \pi l/2)$ заменен его средним значением, равным 1/2). Этот результат справедлив в случае а), когда $rU(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$.

Для более сингулярных при $r \rightarrow 0$ потенциалов формула (1) неприменима ввиду расходимости в ней интеграла. Такая расходимость означает, что теперь область малых r играет доминирующую роль и в ней нельзя заменять $J_\mu(x)$ ее асимптотикой. Разбив область интегрирования по r в выражении (XIII.12) на две: от $r = 0$ до некоторого малого, но конечного R и от $r = R$ до бесконечности, замечаем, что вклад второго из этих интегралов в значение δ_l , как и в (1), пропорционален k^{-1} . Доминирующим же является вклад первого из интегралов, в котором можно

¹³⁾ См. в связи с этим интересное обсуждение вопроса о «реальности» векторного потенциала в «Фейнмановских лекциях по физике», т. 6, гл. 15.

положить $U = \alpha/r^\nu$ и, сделав подстановку $x = kr$, получить

$$\delta_l \approx -\frac{\pi m \alpha}{\hbar^2} k^{\nu-2} \int_0^\infty \frac{J_{l+1/2}^2(x) dx}{x^{\nu-1}} =$$

$$= -\frac{\pi m \alpha}{\hbar^2} \frac{\Gamma(\nu-1) \Gamma(l+(3-\nu)/2)}{2^{\nu-1} \Gamma^2(\nu/2) \Gamma(l+(\nu+1)/2)} k^{\nu-2} \approx k^{\nu-2}, \quad (2)$$

$$1 < \nu \leq 2.$$

Здесь для указанных значений¹⁴⁾ ν верхний предел интегрирования, равный kR , при $k \rightarrow \infty$ заменен на ∞ . При $\nu = 1$ такая замена не оправдана ввиду расходимости интеграла (на верхнем пределе). Воспользовавшись асимптотикой $J_\mu(x)$ при $x \rightarrow \infty$, легко вычислить его расходящуюся часть и получить

$$\delta_l \approx -\frac{m \alpha}{\hbar^2 k} \ln kR, \quad \nu = 1 \quad (3)$$

(эта формула имеет логарифмическую точность в соответствии с неопределенностью в значении R).

Отметим, что установленная различная зависимость от значения ν закона убывания $\delta_l(k)$ при $k \rightarrow \infty$ отражается на рассеянии частиц лишь с большим изменением их импульса. Это связано с тем, что $f^B \approx \tilde{U}(q)$ при больших значениях q определяется особенностями потенциала $U(r)$ как функции r . Для сингулярных при $r \rightarrow 0$ потенциалов $U \approx \alpha/r^\nu$ имеем $\tilde{U} \approx q^{\nu-3} \approx k^{\nu-3}$ при $q \rightarrow \infty$. На величину же полного сечения рассеяния, $\sigma \approx 1/E$, определяемого моментами $l \sim kR \gg 1$, такое различие в энергетической зависимости фаз с фиксированным значением l не влияет.

13.26. В выражении (XIII.12) при значениях $l \sim kR \gg 1$ (R — радиус потенциала) разобьем область интегрирования на две: от $r = 0$ до $r = r_0 \equiv (l + 1/2)/k$ и от $r = r_0$ до $r = \infty$. Во втором из получающихся интегралов воспользуемся приближением тангенсами для функции Бесселя, т. е. асимптотикой

$$J_\nu\left(\frac{\nu}{\cos \beta}\right) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi \nu \operatorname{tg} \beta}} \cos\left(\nu \operatorname{tg} \beta - \beta \nu - \frac{\pi}{4}\right), \quad \nu \gg 1. \quad (1)$$

При этом $\nu = l + 1/2$, а $\nu/\cos \beta = kr$, так что $\nu \operatorname{tg} \beta = k \sqrt{r^2 - r_0^2}$.

¹⁴⁾ При $\nu = 2$ независимость фазового сдвига от k имеет место при любых значениях α и l , даже когда бориновское приближение неприменимо, см. 13.19. Значение интеграла в выражении (2) см. в [33, с. 706]. Отметим также, что для $\nu > 2$ бориновское приближение неприменимо.

После замены быстро осциллирующего множителя $\cos^2[...]$ под интегралом его средним значением, равным $1/2$, получаем

$$\delta_l^B(k) \approx -\frac{m}{\hbar^2 k} \int_{r_0}^{\infty} \frac{rU(r) dr}{\sqrt{r^2 - r_0^2}}. \quad (2)$$

Мы ограничились здесь вкладом в δ_l^B лишь второго из указанных выше интегралов, так как вклад первого пренебрежимо мал. Его малость связана с тем, что при $v \gg 1$ функция $J_\nu(x)$ быстро (экспоненциально) убывает с уменьшением x от значения $x = v$. Такое убывание $J_\nu(x)$ — проявление обычного убывания квазиклассической функции в глубь барьера (в данном случае — центробежного барьера; непосредственно оно видно из аналогичной (1) асимптотики, но уже при $x < v$).

По форме (2) совпадает с известным квазиклассическим выражением (XIII.14) для фазового сдвига в случае $|U(r)| \ll \ll E$ (в то время как использование борновского приближения предполагает выполнение более жесткого условия $|U(r)| \ll \hbar v/r$, при этом $|\delta_l^B| \ll 1$).

Согласно (2) зависимость фазового сдвига от l и k (в наиболее существенной области этих параметров) определяется выражением

$$\delta_l^B(k) = g(s)/k, \quad s = (l + 1/2)/k, \quad (3)$$

где функция $g(s)$ зависит от конкретного вида потенциала. При этом в условиях применимости борновского приближения по формуле (XIII.9), заменяя в ней суммирование по l интегрированием, приходим к известному результату $\sigma \propto 1/E$ при $E \rightarrow \infty$ (для короткодействующих потенциалов).

13.27. Для потенциалов с рассматриваемым поведением на больших расстояниях борновская амплитуда при значениях $q \rightarrow 0$ расходится. Так как $q = 2k \sin(\theta/2)$, то при $E \rightarrow 0$ в борновском приближении будет расходиться и полное сечение рассеяния (при этом $q \rightarrow 0$ для всех углов рассеяния). Расходимость сечения рассеяния означает, что в задаче становятся существенными большие расстояния, на которых выполнены условия (XIII.7), так что использование борновского приближения действительно оправдано. При этом согласно (XIII.12) имеем

$$f(q) \approx -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q^{3-\nu}} \int_{qR}^{\infty} \frac{\sin x}{x^{\nu-1}} dx \quad (1)$$

(ограничиваясь рассмотрением лишь расходящихся частей амплитуды и полиного сечения рассеяния, вклад конечных расстояний

$r \leq R$, на которых потенциал не описывается своей асимптотикой, не обсуждаем).

При $\nu < 3$ в выражении (1) можно положить нижний предел интегрирования $qR = 0$ и получить

$$f = \frac{C_\nu}{q^{3-\nu}}, \quad C_\nu = \frac{\pi m \alpha}{\hbar^2 \Gamma(\nu - 1) \cos(\pi\nu/2)}, \quad (2)$$

воспользовавшись значением интеграла

$$\int_0^\infty \frac{\sin x}{x^{\nu-1}} dx = \Gamma(2 - \nu) \sin \frac{\pi\nu}{2} = -\frac{\pi \sin(\pi\nu/2)}{\Gamma(\nu - 1) \sin \pi\nu}.$$

При этом полное сечение рассеяния ($q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$)

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi f^2 \sin \theta d\theta \underset{E \rightarrow 0}{\approx} 2\pi C_\nu^2 \left(\frac{\hbar^2}{4mE}\right)^{3-\nu} \int_{-1}^1 \frac{dz}{(1-z)^{3-\nu}} \propto \frac{1}{E^{3-\nu}} \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Для случая $\nu = 3$ заменять нижний предел интегрирования в (1) нулем нельзя из-за расходимости интеграла. Так как $\sin x \approx x$ при $x \rightarrow 0$, то расходящаяся часть интеграла равна $\ln(1/qR)$, так что

$$f \approx \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \ln qR, \quad (4)$$

а полное сечение рассеяния

$$\sigma = \int f^2 d\Omega \approx \int \frac{4m^2\alpha^2}{\hbar^4} \ln^2 kR d\Omega = \frac{16\pi m^2\alpha^2}{\hbar^4} \ln^2 kR \rightarrow \infty \quad (5)$$

(при вычислении расходящейся, $\propto \ln^2 k$, части сечения можно положить $\ln qR \approx \ln kR$; неопределенность в значении R характеризует логарифмическую точность формул (4) и (5)).

13.28. При $k \rightarrow 0$ аргумент $x = kr$ функции Бесселя в выражении (XIII.12) мал и, вообще говоря, можно воспользоваться известным разложением $J_\mu(x)$ при $x \rightarrow 0$. Оставляя лишь первые два члена разложения¹⁵⁾, получаем

$$\delta_l^B(k) \approx k^{2l+1} [A_l + B_l k^2 + \dots] \propto k^{2l+1}, \quad (1)$$

¹⁵⁾ Описываемые преобразования справедливы и при фиксированном конечном значении k , но $l \gg (kR)^2$, что позволяет сделать заключение о фазовых сдвигах для больших значений момента: $\delta_l \propto (kR/l)^{2l+1}$.

здесь

$$A_l = c_l \int_0^{\infty} U(r) r^{2l+2} dr, \quad B_l = - \frac{c_l}{2l+3} \int_0^{\infty} U(r) r^{2l+4} dr, \quad (2)$$

$$\text{а } c_l = - \pi m / 2^{2l+1} \Gamma^2(l+3/2) \hbar^2.$$

Имея в виду разложение эффективного радиуса (XIII.15) и учитывая малость фазового сдвига в борновском приближении, находим

$$a_l^B = -A_l, \quad r_l^B = -2B_l A_l^{-2}. \quad (3)$$

Одним из условий применимости полученных результатов является достаточно быстрое убывание потенциала на больших расстояниях, обеспечивающее сходимость интегралов в выражениях (2). При экспоненциальном убывании потенциала не возникает никаких ограничений для всех значений l . Для потенциалов со степенным убыванием, $U \approx \alpha/r^\nu$, ситуация иная. Для значений $l < (\nu - 5)/2$ интегралы в (2) сходятся на верхнем пределе и понятия длины рассеяния a_l и эффективного радиуса r_l по-прежнему определены. В случае $(\nu - 5)/2 \leq l < (\nu - 3)/2$ второй из интегралов (2) расходится. При этом разложение эффективного радиуса (XIII.15) уже несправедливо, однако понятие длины рассеяния и зависимость $\delta_l \approx -a_l k^{2l+1}$ для медленных частиц сохраняются. Наконец, для значений $l \geq \frac{\nu-3}{2}$ нарушается и зависимость $\delta_l \propto k^{2l+1}$ при $k \rightarrow 0$. Низкоэнергетическое рассеяние с произвольным моментом l в потенциалах со степенным «хвостом» рассмотрено в двух следующих задачах, см. также 13.27.

13.29. Для значений $l < (\nu - 3)/2$, как обычно [1, § 132], $\delta_l = A_l k^{2l+1}$. В борновском приближении коэффициент A_l в этой зависимости получен в предыдущей задаче. В случае $l \geq (\nu - 3)/2$ заменять в формуле (XIII.12) функцию Бесселя $J_\mu(x)$ ее первым, $\propto x^\mu$, членом разложения, приводящим к зависимости $\delta_l \propto k^{2l+1}$, нельзя ввиду возникновения расходимости интеграла. Теперь, разбив область интегрирования в (XIII.12) на две: от $r = 0$ до $r = R$ и от $r = R$ до $r = \infty$ (значение R таково, что при $r > R$ для потенциала можно использовать его асимптотическое выражение), замечаем, что вклад первой из об-

¹⁶⁾ При этом зависимость $\delta_l \propto k^{2l+1}$ справедлива и для «сильных» потенциалов, к которым борновское приближение неприменимо.

ластей, пропорциональный k^{2l+1} , менее существен, чем вклад второй области. Таким образом находим

$$\delta_l \approx -\frac{\pi m a}{\hbar^2} k^{\nu-2} \int_{kR}^{\infty} \frac{1}{x^{\nu-1}} J_{l+1/2}^2(x) dx. \quad (1)$$

При значениях $l > (\nu - 3)/2$ здесь можно заменить нижний предел интегрирования нулем и получить (интеграл см. в [33, с. 706])

$$\delta_l \approx -\frac{\pi m a}{\hbar^2} \frac{\Gamma(\nu - 1) \Gamma(l + (3 - \nu)/2)}{2^{\nu-1} \Gamma^2(\nu/2) \Gamma(l + (\nu + 1)/2)} k^{\nu-2}. \quad (2)$$

В случае $l = (\nu - 3)/2$ интеграл в выражении (1) при $k \rightarrow 0$ расходится на нижнем пределе. Воспользовавшись разложением $J_\mu(x)$ при $x \rightarrow 0$, легко найти расходящуюся часть интеграла и значение фазового сдвига

$$\delta_l \approx \frac{\pi m a}{2^{2l+1} \Gamma^2(l + 3/2)} k^{2l+1} \ln kR. \quad (3)$$

Сделаем два заключительных замечания.

1) Хотя полученные результаты основаны на использовании борновского приближения, они на самом деле при $\nu > 2$ носят достаточно общий характер. Действительно, в задаче существенны большие расстояния, на которых $|U(r)| \ll \hbar^2/mr^2$, так что потенциал можно рассматривать как возмущение.

2) Для потенциала, представляющего суперпозицию «сильного» короткодействующего и «слабого» далекодействующего (со степенной асимптотикой) потенциалов, вообще говоря¹⁷⁾, их вклады в фазовый сдвиг аддитивны, $\delta_l \approx \delta_{l, \text{кор}} + \delta_{l, \text{дал}}$. При этом для аномально малых k доминирующим будет вклад далекодействующего потенциала, а для не слишком малых k — уже вклад короткодействующего потенциала; см. в связи с этим 13.37, а также 13.42.

13.30. Имея в виду решения двух предыдущих задач, нетрудно получить следующие разложения:

$$\begin{aligned} \delta_l + a_l k^{2l+1} \approx & -\frac{\pi m a}{\hbar^2} k^{\nu-2} \int_0^{\infty} \frac{1}{x^{\nu-1}} \times \\ & \times \left[J_{l+1/2}^2(x) - \frac{x^{2l+1}}{2^{2l+1} \Gamma^2(l + 3/2)} \right] dx, \quad (1) \\ & (\nu - 5)/2 < l < (\nu - 3)/2. \end{aligned}$$

¹⁷⁾ Исключая случай, когда в короткодействующем потенциале имеется состояние с малой энергией связи.

В случае $l = (\nu - 5)/2$ в аналогичном (1) выражении нижний предел интегрирования равен kR и, вычисляя расходящуюся часть интеграла, находим

$$\delta_l + a_l k^{2l+1} \approx - \frac{\pi m a}{2^{2l+1} (2l+3) \Gamma^2(l+3/2)} k^{2l+3} \ln kR. \quad (2)$$

В частности, для потенциала, имеющего на больших расстояниях вид $U \approx \alpha/r^4$ (т. е. $\nu = 4$), при $l = 0$ согласно формуле (1) получаем

$$\delta_0 + a_0 k^{2l+1} \approx - \frac{2m\alpha}{\hbar^2} k^2 \int_0^\infty \frac{1}{x^3} \left[\frac{\sin^2 x}{x} - x \right] dx = \frac{2\pi m a}{3\hbar^2} k^2.$$

При этом обобщение разложения эффективного радиуса (XIII. 15) принимает вид

$$k \operatorname{ctg} \delta_0(k) \approx - \frac{1}{a_0} + \frac{2\pi m a}{3\hbar^2 a_0^2} k.$$

13.31. Для вычисления длины рассеяния a_0 следует найти ограниченное решение радиального уравнения Шрёдингера с $E = 0$ и $l = 0$. Его асимптотика¹⁸⁾

$$R_{l=0, E=0} \approx (1 - a_0/r) \quad \text{при } r \rightarrow \infty$$

определяет значение a_0 . Решения у. Ш. для рассматриваемых потенциалов обсуждалась в задачах главы 4, поэтому здесь ограничимся лишь некоторыми замечаниями¹⁹⁾; ниже $\chi = rR_{E=0, l=0}$ и $\lambda = \sqrt{2mU_0 R^2/\hbar^2}$.

а) Для прямоугольной потенциальной ямы

$$\chi = \begin{cases} A \sin(\lambda r/R), & r < R, \\ r - a_0, & r > R. \end{cases}$$

Из условий непрерывности χ и χ' в точке $r = R$ находим

$$a_0 = \left(1 - \frac{1}{\lambda} \operatorname{tg} \lambda\right) R. \quad (1)$$

б) Для δ -сферического потенциала

$$\chi = \begin{cases} Cr, & r < R, \\ a_0 - r, & r > R. \end{cases}$$

¹⁸⁾ Такая асимптотика предполагает более быстрое, чем $\sim 1/r^3$, убывание потенциала на больших расстояниях.

¹⁹⁾ Используемое для состояний д.с. граничное условие $\Psi(\infty) = 0$ теперь, естественно, не возникает.

Сшивание решения в точке $r = R$, см. 4.8, дает

$$a_0 = - \frac{\lambda^2}{1 - \lambda^2} R. \quad (2)$$

в) Для экспоненциального потенциала решение радиального уравнения Шрёдингера

$$\chi = J_0(2\lambda) N_0(x) - N_0(2\lambda) J_0(x), \quad \text{где } x = 2\lambda e^{-r/2R},$$

J_0 и N_0 — функции Бесселя и Неймана. При этом учтено граничное условие $\chi(r=0) = 0$, сравнить с 4.8. Так как при $r \rightarrow \infty$ имеем $x \rightarrow 0$, то, используя соотношения ($\gamma = e^{\mathcal{C}} = 1,781\dots$, $\mathcal{C} = 0,5772\dots$ — постоянная Эйлера)

$$J_0(x) \approx 1 - \frac{x^2}{4},$$

$$N_0(x) \approx \frac{2}{\pi} J_0(x) \ln \frac{x}{2} + \frac{2\mathcal{C}}{\pi} + \frac{1}{2\pi} (1 - \mathcal{C}) x^2, \quad |x| \ll 1,$$

по асимптотике $\chi(r)$ находим длину рассеяния

$$a_0 = \frac{\pi R}{J_0(2\lambda)} \left[\frac{2}{\pi} J_0(2\lambda) \ln \gamma \lambda - N_0(2\lambda) \right]. \quad (3)$$

г) Для указанного потенциала решение у.Ш. имеет вид (сравнить с 4.25)

$$\Psi_{E=0, l=0} = C \sqrt{1 + \frac{R^2}{r^2}} \sin \left(\xi \operatorname{arctg} \frac{r}{R} \right),$$

где $\xi = \sqrt{1 + \lambda^2}$. По его асимптотике находим

$$a_0 = \xi R \operatorname{ctg} \left(\frac{1}{2} \pi \xi \right). \quad (4)$$

д) Аналогично решению задачи 4.25 находим волновую функцию $\Psi_{E=0, l=0} = A \exp(-\lambda R/r)$ и длину рассеяния

$$a_0 = \lambda R. \quad (5)$$

Переходя к обсуждению полученных результатов, прежде всего отметим существенное отличие характера зависимости длины рассеяния a_0 от параметра $\lambda \propto \sqrt{U_0}$ при $U_0 \rightarrow 0$ в случае д) по сравнению с другими случаями а) — г). Согласно (1) — (4) a_0 при малых λ разлагается в ряд по степеням λ^2 и является аналитической функцией параметра U_0 . При этом в зависимости от знака U_0 эти выражения определяют длину рассеяния либо в потенциале притяжения, $U_0 > 0$, либо в потенциале отталкива-

ния — при $U_0 < 0$. Так, формула (1) при $U_0 < 0$ принимает вид

$$a_0 = \left(1 - \frac{1}{|\lambda|} \operatorname{th} |\lambda| \right) R$$

и описывает длину рассеяния на потенциальном барьере. В случае потенциала $U = \alpha/r^4$, $\alpha = U_0 R^4$, зависимость a_0 от параметра α (или U_0) является уже неаналитической, так как $a_0 \propto \sqrt{\alpha}$. Такая неаналитичность отражает существенно различный характер влияния потенциала на частицу при малых значениях $\alpha > 0$ и $\alpha < 0$, проявляющийся в возникновении «падения на центр» в случае ²⁰⁾ $\alpha < 0$. При этом формула (5) несправедлива, так

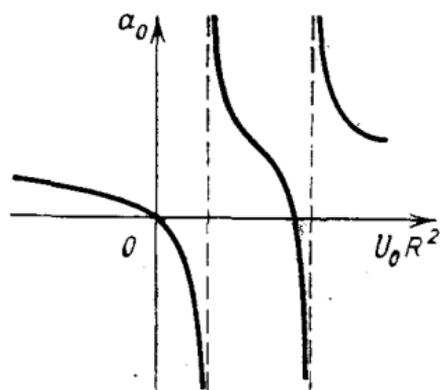


Рис. 48

как использованное при ее выводе граничное условие $\Psi(0) = 0$ уже не может быть реализовано и требует модификации, сравнить с 9.14.

Далее, формулы (1)–(4) отражают общий характер зависимости длины рассеяния a_0 от параметров U_0 и R для знакопостоянного (как функции r) регулярного потенциала вида $U(r) = -U_0 f(r/R)$, где $f(|z|) \geq 0$ (притяжение — при $U_0 > 0$ и от-

талкивание — при $U_0 < 0$). Качественный ее характер изображен на рис. 48. Здесь проявляются следующие закономерности.

1) При $|\lambda|^2 \ll 1$ («слабый» потенциал) длина рассеяния также мала, так как $|a_0| \sim |\lambda|^2 R \ll R$. Записав $a_0 = -\beta \lambda^2 R$, согласно (1)–(4) находим значения параметра β , равные соответственно $1/3$, 1 , 2 , $\pi/4$. Эти результаты могут быть получены непосредственно по формуле борновского приближения

$$a_0^B = -f^B(E=0) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) dV,$$

при этом знак длины рассеяния совпадает со знаком потенциала.

2) При увеличении $|\lambda|^2$ величина длины рассеяния также возрастает. При этом зависимость a_0 от U_0 является монотонной, кроме *исключительных* значений λ_n параметра λ в случае притяжения, при которых длина рассеяния a_0 обращается в бесконеч-

²⁰⁾ Сравнить с аналогичным свойством фаз рассеяния δ_l в случае потенциала притяжения $U = -|\alpha|/r^2$, следующим из формулы (1) задачи 13.19, когда при $2m|\alpha|/\hbar^2 = (l + 1/2)^2$ возникает «падение на центр» частицы с моментом l .

ность. Такие значения λ_n отвечают условию возникновения в потенциале нового связанного состояния с моментом $l = 0$ по мере углубления ямы ²¹⁾. Действительно, асимптотика волновой функции при $r \rightarrow \infty$ в момент появления связанного состояния имеет вид $\Psi_{E=0} \propto 1/r$ (а не $C_1 + C_2/r$, как в общем случае, сравнить с 4.25), что и соответствует длине рассеяния $a_0 = \infty$.

Покажем монотонность изменения a_0 с изменением U_0 в случае знакопостоянного потенциала. Запишем два уравнения Шрёдингера:

$$\chi_0'' = -\frac{2m}{\hbar^2} U_0 f\left(\frac{r}{R}\right) \chi_0, \quad \chi'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 + \delta U_0) f\left(\frac{r}{R}\right) \chi$$

при значениях $E = 0$ и $l = 0$. Граничные условия имеют вид $\chi_0(0) = \chi(0) = 0$, а асимптотика решений при $r \rightarrow \infty$ соответственно $\chi_0 \approx a_0 - r$ и $\chi \approx a - r$, причем $a = a_0 + \delta a_0$ (δa_0 определяет изменение длины s-рассеяния при изменении потенциала на $-\delta U_0 f$). Умножая первое из уравнений на χ , второе — на χ_0 , почленно вычитая их друг из друга и интегрируя по r в пределах от 0 до ∞ , получаем

$$\delta a_0 = -(\chi \chi_0' - \chi_0 \chi') \Big|_0^\infty \approx -\frac{2m}{\hbar^2} \delta U_0 \int_0^\infty f\left(\frac{r}{R}\right) \chi_0^2(r) dr.$$

В интеграле положено, $\chi \approx \chi_0$, что имеет место ввиду предполагаемой малости $\delta U_0 \rightarrow 0$ и условия $a_0 \neq \infty$; при этом δa_0 также мал, причем $\delta a_0 / \delta U_0 < 0$, что и доказывает монотонность зависимости $a_0(U_0)$.

3) Наряду со значениями λ , близкими к λ_n , для которых длина рассеяния аномально велика (резонансное рассеяние), существуют и такие значения $\tilde{\lambda}_n$ параметра λ , при которых, наоборот, $a_0 = 0$. Так, в случае прямоугольной ямы согласно (1) это имеет место при условии $\text{tg } \tilde{\lambda}_n = \tilde{\lambda}_n$. Для таких значений $\tilde{\lambda}_n$ параметров потенциала сечение рассеяния $\sigma = 4\pi a_0^2$ частиц с энергией $E = 0$ обращается в нуль. Соответственно при значениях λ , близких к $\tilde{\lambda}_n$, сечение рассеяния медленных частиц, $kR \ll 1$, может быть аномально малым, что и проявляется в эффекте Рамзауэра — Таунсенда. Подчеркнем, что отмеченная малость сечения рассеяния, $\sigma \ll \pi R^2$, медленных частиц в «сильном» короткодействующем потенциале радиуса R может возникать только в том случае, если он имеет притягивающий характер.

²¹⁾ В случае δ -ямы при ее углублении появляется только одно связанное состояние с моментом $l = 0$ при значении параметра $\lambda \geq \lambda_0 = 1$, см. (2).

Наконец, отметим следующую закономерность для длины рассеяния в случае очень сильного потенциала, когда $|\lambda| \gg 1$. Если потенциал имеет резко выраженный радиус R , как для прямоугольной или δ -ямы (или соответствующих барьеров), то при этом $a_0 \approx R$, исключая лишь очень узкие области значений λ вблизи точек ²²⁾ λ_n , см. выражения (1), (2). Подобная ситуация сохраняется и в случае резко — экспоненциально — спадающих потенциалов. Из формулы (3) при $\ln \gamma \lambda \gg 1$ имеем $a_0 \approx R_{\text{эф}} \approx \approx 2R \ln \gamma \lambda$, исключая близкие к нулям функции Бесселя $J_0(2\lambda)$ значения λ , отвечающие появлению новых связанных состояний. Отличие от предыдущего случая состоит лишь в слабой, логарифмической зависимости $R_{\text{эф}}$ от λ , которая может быть получена из соотношения $|U(R_{\text{эф}})| \approx \hbar^2/mR_{\text{эф}}^2$. Для потенциалов со степенным убыванием, как видно из формулы (4), ситуация иная. Теперь $a_0(\lambda)$ является «живой» функцией λ во всем интервале между точками λ_n и λ_{n+1} и выполаживания зависимости $a_0(\lambda)$ не происходит.

13.32. Задача сводится к решению уравнения Шрёдингера с энергией $E = 0$, принимающего вид $\Delta\Psi(\mathbf{r}) = 0$, с граничным условием $\Psi(\mathbf{r}_0) = 0$ на поверхности эллипсоида и асимптотикой решения $\Psi \approx 1 - a_0/r$ на больших расстояниях, определяющей длину рассеяния ²³⁾ $a_0 = -f(E = 0)$.

Для функции $\varphi(\mathbf{r}) = 1 - \Psi$ уравнение, граничное и асимптотическое условия принимают вид

$$\Delta\varphi = 0, \quad \varphi(\mathbf{r}_0) = 1, \quad \varphi \approx a_0/r \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty. \quad (1)$$

Согласно соотношениям (1) функцию $\varphi(\mathbf{r})$ можно рассматривать как электростатический потенциал заряженного эллипсоида вращения (ось вращения — ось z), принимающий на его поверхности значение $\varphi_0 = 1$; при этом $e = a_0$ — заряд эллипсоида. Так как $e = C\varphi_0$, где C — емкость проводника, то длина рассеяния частиц на «непроницаемом» эллипсоиде численно равна электростатической емкости проводника такой же формы ²⁴⁾. Решение

²²⁾ Эти узкие области включают и точки $\tilde{\lambda}_n$. Как видно из (1), (3), для быстро спадающих потенциалов λ_n и $\tilde{\lambda}_n$ сближаются при $n \rightarrow \infty$; для степенного потенциала — см. (4) — это замечание несправедливо.

²³⁾ Подчеркнем, что в пределе нулевой энергии рассеяние частиц является изотропным даже в случае нецентрального короткодействующего взаимодействия.

²⁴⁾ Соотношение $a_0 = C$ справедливо для «непроницаемого» тела произвольной формы. В частности, при рассеянии частиц на непроницаемом диске радиуса R сечение рассеяния $\sigma(E=0) = = (16/\pi)R^2$ (емкость диска $C = 2R/\pi$).

электростатической задачи (1) для вытянутого эллипсоида вращения известно и имеет вид (при $c > b$)

$$\varphi(r) = \frac{e}{2\sqrt{c^2 - b^2}} \times \times \ln \frac{z + \sqrt{c^2 - b^2} + [(z + \sqrt{c^2 - b^2})^2 + x^2 + y^2]^{1/2}}{z - \sqrt{c^2 - b^2} + [(z - \sqrt{c^2 - b^2})^2 + x^2 + y^2]^{1/2}} \quad (2)$$

(оно может быть получено методом изображений: потенциал такого проводящего эллипсоида вращения совпадает с потенциалом равномерно заряженного отрезка, концы которого находятся в фокусах эллипсоида с координатами $x = y = 0, z = \pm \sqrt{c^2 - b^2}$). Определяя e из условия $\varphi(r_0) = 1$ (для чего удобно выбрать точку эллипсоида, лежащую на оси вращения: $x = y = 0, z = c$), находим длину рассеяния

$$a_0 = e = 2\sqrt{c^2 - b^2} \left[\ln \frac{c + \sqrt{c^2 - b^2}}{c - \sqrt{c^2 - b^2}} \right]^{-1} \quad (3)$$

Отсюда в случае $c = b$ имеем $a_0 = c$ и $\sigma = 4\pi c^2$ — известный результат для рассеяния медленных частиц непроницаемой сферой радиуса $R = c$. Для сильно вытянутого эллипсоида, $c \gg b$, формула (3) дает

$$a_0 \approx \frac{c}{\ln(2c/b)}, \quad \sigma(E=0) \approx \frac{4\pi c^2}{[\ln(2c/b)]^2} \quad (4)$$

Заметим, что обобщение на случай сплюснутого эллипсоида вращения, $b > c$, может быть получено с помощью аналитического продолжения длины рассеяния (3). Для этого, записав $\sqrt{c^2 - b^2} = i\sqrt{b^2 - c^2} \equiv iv$, воспользуемся соотношением

$$\ln(c \pm iv) = \frac{1}{2} \ln(c^2 + v^2) \pm i \operatorname{arctg} \frac{v}{c}.$$

Отсюда

$$\ln \frac{c + iv}{c - iv} = 2i \operatorname{arctg} \frac{v}{c} = 2i \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{b^2 - c^2}}{c} = 2i \operatorname{arccos} \frac{c}{b},$$

и для длины рассеяния получаем ($b > c$)

$$a_0 = \frac{\sqrt{b^2 - c^2}}{\operatorname{arccos}(c/b)}. \quad (5)$$

Положив здесь $c = 0$ и $b = R$, приходим к длине рассеяния $a_0 = 2R/\pi$ на непроницаемом диске радиуса R .

13.33. На конечных расстояниях квазиклассическое решение уравнения (IV.5) для функции $\chi = rR(r)$ при значениях $E = 0$

и $l = 0$ следует выбрать в виде

$$\chi_{\text{кв}}(r) = \frac{C}{\sqrt{|p|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_r^{\infty} |p| dr \right\}, \quad |p| = \sqrt{2mU(r)}. \quad (1)$$

Здесь оставлена лишь затухающая к началу координат квазиклассическая в.ф. Пренебрежение возрастающей частью решения соответствует учету граничного условия²⁵⁾ $\chi(0) = 0$.

Однако на больших расстояниях, при $r \rightarrow \infty$, имеем $|p(r)| \propto 1/r^2 \rightarrow 0$ и квазиклассика неприменима. Поэтому решение (1) на больших расстояниях, где уже $U \approx \alpha/r^4$, следует сшить с точным решением у.Ш., асимптотика которого $\chi(r) \approx a_0 - r$ определяет длину рассеяния. Такое точное решение имеет вид (см. 4.25)

$$\chi = r \left[\frac{a_0}{d} \operatorname{sh} \frac{d}{r} - \operatorname{ch} \frac{d}{r} \right] \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} a_0 - r, \quad d = \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}}. \quad (2)$$

Сшивание решений (1) и (2) может быть выполнено лишь в случае, если в (2), как и в (1), на конечных расстояниях отсутствует экспоненциально возрастающее к началу координат слагаемое. Отсюда находим значение длины рассеяния в квазиклассическом приближении:

$$a_{0, \text{кв}} = d = \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}}. \quad (3)$$

Этот результат для потенциала, имеющего вид $U = \alpha/r^4$ во всем пространстве, совпадает с точным.

Для указанных в условии потенциалов точные значения длины рассеяния (см. 13.31e); $\xi = \sqrt{2m\alpha/\hbar^2 R^2} = d/R$:

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad a_0 &= R \sqrt{\xi^2 - 1} \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \pi \sqrt{\xi^2 - 1} \right), \\ \text{б)} \quad a_0 &= R \xi \left(\operatorname{cth} \xi - \frac{1}{\xi} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Как и следовало ожидать, они при $\xi \rightarrow \infty$ переходят в (3). Однако и для значений $\xi \gg 1$ квазиклассический результат не силь-

²⁵⁾ Если $U(r)$ — ограниченный потенциал, то в этом случае $\chi_{\text{кв}}(0)$ хотя и отлично от нуля, но экспоненциально мало. Такое нарушение граничного условия приводит лишь к экспоненциально малым погрешностям в значениях и других величин. Более существенны поправки, связанные с отклонением потенциала от его асимптотического выражения на больших расстояниях, см. следующую задачу.

но отличается от точного. Для иллюстрации приведем таблицу, в которой представлено отношение $\eta = a_0, \text{кв}/a_0$ для ряда ξ :

ξ	1	2	4	6
$\eta, a)$	1,571	1,145	1,033	1,014
$\eta, б)$	3,202	1,862	1,332	1,200

Меньшая точность в случае б) связана с более существенной ролью квазиклассических поправок, обусловленных отличием потенциала $U(r)$ на больших расстояниях от его асимптотического выражения α/r^4 ; см. по этому поводу следующую задачу.

13.34. Если потенциал $U(r)$ отличается от α/r^4 лишь на конечных расстояниях $r \leq R$, то для $\xi = \sqrt{2ma/\hbar^2} R^2 \gg 1$ отличие a_0 от квазиклассического значения $\sqrt{2ma/\hbar^2}$ экспоненциально мало и находится за пределами точности квазиклассического приближения.

Если же разность $U(r) - \alpha/r^4$ отлична от нуля и при $r > R$, то возникают степенные поправки по параметру $1/\xi \propto \hbar$. Для определения первой такой поправки в случае, когда $U(r) \approx \frac{\alpha}{r^4} \left(1 + \frac{b}{r}\right)$ при $r \rightarrow \infty$, надо найти такое решение у. Ш. на больших расстояниях, точность которого обеспечивает корректный учет поправочного члена в асимптотике потенциала. Это легко сделать, заметив, что с рассматриваемой точностью $U = \alpha/(r - b/4)^4$, а для такого потенциала уравнение Шрёдингера допускает точное решение. Оно очевидным образом (заменой r на $r - b/4$) может быть получено из формулы (2) предыдущей задачи и имеет вид

$$\chi = - \left(r - \frac{b}{4} \right) \exp \left[- \frac{\sqrt{2ma}}{\hbar} \left(r - \frac{b}{4} \right) \right]. \quad (1)$$

При этом сразу опущено второе независимое решение у. Ш., экспоненциально растущее с уменьшением r , как этого требует сшивание (1) с квазиклассическим решением на конечных расстояниях. По асимптотике выражения (1) при $r \rightarrow \infty$ получаем

$$a_0, \text{кв} = \sqrt{\frac{2ma}{\hbar^2}} \left(1 + \frac{\hbar b}{\sqrt{32ma}} \right). \quad (2)$$

Аналогичным образом для потенциала с асимптотикой

$$U(r) = \frac{\alpha}{r^4} \left(1 + \frac{b_1}{r} + \frac{b_2}{r^2} + \dots \right)$$

может быть найдена и следующая квазиклассическая поправка к формуле (2), если заметить, что с рассматриваемой точностью его можно записать в виде

$$U = \frac{\alpha}{[(r+b)^2 + R^2]^2}, \quad \text{где } b = -\frac{1}{4} b_1, \quad R^2 = \frac{5}{16} b_1^2 - \frac{1}{2} b_2.$$

Для такого потенциала решение у.Ш. с $E = 0$ может быть получено как в 4.25, после чего легко найти уточнение формулы (2):

$$a_{0, \text{кв}} = \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}} \left(1 + \frac{\hbar b_1}{\sqrt{32m\alpha}} + \frac{\hbar^2}{64m\alpha} (8b_2 - 5b_1^2) \right). \quad (3)$$

Учет квазиклассических поправок существенно увеличивает точность полученного результата. Так, согласно формуле (3) вместо чисел, приведенных в таблице предыдущей задачи, теперь появляются соответственно: 0,786; 1,002; 1,0005; 1,0001 в случае а) и 0; 0,931; 0,999; 0,99998 в случае б).

В заключение приведем квазиклассические выражения для длины рассеяния a_0 в случае потенциалов отталкивания с другим асимптотическим поведением при $r \rightarrow \infty$.

В случае степенной асимптотики $U = \frac{\alpha}{r^\nu} \left(1 + \frac{b}{r} + \dots \right)$ с $\nu > 3$ можно получить

$$a_{0, \text{кв}} = \frac{\Gamma[(\nu-3)/(\nu-2)]}{\Gamma[(\nu-1)/(\nu-2)]} \left(\frac{2m\alpha}{(\nu-2)^2 \hbar^2} \right)^{1/(\nu-2)} + \frac{b}{\nu}, \quad (4)$$

где $\Gamma(z)$ — гамма-функция. При $\nu \rightarrow 3$ имеем $a_{0, \text{кв}} \rightarrow \infty$, что отражает то обстоятельство, что в потенциале $U = \alpha/r^3$ сечение рассеяния частиц при $E \rightarrow 0$ обращается в бесконечность.

Для потенциала с экспоненциальным убыванием, $U \approx U_0 e^{-r/R}$:

$$a_{0, \text{кв}} = R \left[\ln \left(\frac{2mU_0 R^2}{\hbar^2} \right) + 2\mathcal{E} \right], \quad (5)$$

где $\mathcal{E} = 0,5772\dots$ — постоянная Эйлера.

13.35. На конечных расстояниях квазиклассическое решение у.Ш. (IV.5) для $E = 0$ и $l = 0$ имеет вид (сравнить с 9.9)

$$\chi_{\text{кв}} = rR(r) = \frac{C}{\sqrt{p(r)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_0^r p(r) dr + \gamma \right), \quad (1)$$

$$p = \sqrt{-2mU(r)},$$

где значение параметра γ зависит от вида потенциала на малых расстояниях; в случае $U \approx -A/r^\beta$ при $r \rightarrow 0$ имеем

$$\gamma = -\pi\beta/4 (2 - \beta).$$

На больших расстояниях $p(r) \rightarrow 0$ и квазиклассика неприменима. Здесь, однако, учитывая вид потенциала $U \approx -\alpha/r^\nu$, можно получить точное решение уравнения Шрёдингера:

$$\chi = \sqrt{r} [C_1 J_s(2s \sqrt{\tilde{\alpha}} r^{-1/2s}) + C_2 J_{-s}(2s \sqrt{\tilde{\alpha}} r^{-1/2s})], \quad (2)$$

где $s = 1/(\nu - 2)$, а $\tilde{\alpha} = 2ma/\hbar^2$. На расстояниях r , для которых аргумент функции Бесселя велик, уже применимо квазиклассическое приближение и наряду с выражением (2) справедливо и (1). При этом, воспользовавшись асимптотикой функций Бесселя $J_\nu(z)$ при $z \rightarrow \infty$, решение (2) можно преобразовать к виду

$$\chi = \sqrt{\frac{\pi s \hbar}{p(r)}} \left[C_1 \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p dr - \frac{\pi s}{2} + \frac{\pi}{4} \right) + C_2 \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_r^\infty p dr + \frac{\pi s}{2} + \frac{\pi}{4} \right) \right], \quad (3)$$

где $p(r) = \sqrt{2m\alpha/r^\nu}$, и из условия совпадения выражений (3) и (1) получить

$$\frac{C_1}{C_2} = - \frac{\sin(\tau + \pi s/2 + \pi/4)}{\sin(\tau - \pi s/2 + \pi/4)},$$

$$\tau = \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty \sqrt{-2mU(r)} dr + \gamma. \quad (4)$$

Далее, воспользовавшись разложением $J_{\pm s}(z)$ при $z \rightarrow 0$, находим асимптотику решения (2) на больших расстояниях:

$$\chi(r) \approx \frac{C_1}{\Gamma(1+s)} (s \sqrt{\tilde{\alpha}})^s + \frac{C_2}{\Gamma(1-s)} (s \sqrt{\tilde{\alpha}})^{-s} r, \quad r \rightarrow \infty, \quad (5)$$

и так как при этом $\chi \propto r - a_0$, то с учетом соотношения (4) приходим к искомому квазиклассическому выражению для длины рассеяния:

$$a_{0, \text{кв}}^{(0)} = \frac{\Gamma(1-s)}{\Gamma(1+s)} \frac{\sin(\tau + \pi s/2 + \pi/4)}{\sin(\tau - \pi s/2 + \pi/4)} \left(s \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}} \right)^{2s}. \quad (6)$$

Значения параметров потенциала, при которых длина рассеяния обращается в бесконечность, соответствуют такой ситуации, когда при углублении потенциальной ямы в ней появляется новое по счету состояние дискретного спектра. Согласно формулам (6), (4) это имеет место при выполнении условия

($l = 0$)

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} \sqrt{-2mU(r)} dr = \pi \left(N + \frac{\beta}{4(2-\beta)} + \frac{1}{2(\nu-2)} - \frac{1}{4} \right), \quad (7)$$

где $N = 1, 2, \dots$ — порядковый номер появляющегося связанного состояния; сравнить с 9.9.

Для указанных в условии потенциалов имеем $\nu = 4$, $s = 1/2$, $\gamma = \beta = 0$ и по формуле (6) получаем

$$\begin{aligned} \text{а) } a_{0, \text{кв}}^{(0)} &= R\xi \operatorname{ctg} \xi, \\ \text{б) } a_{0, \text{кв}}^{(0)} &= R\xi \operatorname{ctg} \left(\frac{\pi}{2} \xi \right), \end{aligned} \quad (8)$$

где $\xi = \sqrt{\bar{\alpha}}/R$. Точное значение длины рассеяния равно соответственно ²⁶⁾

$$\begin{aligned} \text{а) } a_0 &= R(\xi \operatorname{ctg} \xi - 1), \\ \text{б) } a_0 &= R \sqrt{\xi^2 + 1} \operatorname{ctg}(\pi \sqrt{\xi^2 + 1}/2). \end{aligned} \quad (9)$$

Как видно, при $\xi \rightarrow \infty$ квазиклассическое и точное выражения для длины рассеяния совпадают. Их различие $\sim 1/\xi$ при конечных значениях ξ связано с квазиклассическими поправками. Вычисление таких поправок теперь более трудоемко, сравнить с 13.34, так как необходимо учитывать следующее по \hbar слагаемое в фазе волновой функции на конечных расстояниях (т. е. в области квазиклассичности), см. формулу (46.11) в [1]. Этот вопрос предлагается читателю для самостоятельного исследования.

13.36. Воспользуемся приемом, описанным в 11.4. Исходим из выражения для сдвига уровня обычной теории возмущений по потенциалу $U_S(r)$:

$$\Delta E_{n,l} = \overline{U_S(r)} = \int U_S(r) |\Psi_{n,l,m}^{(0)}(r)|^2 dV. \quad (1)$$

Учитывая, что на существенных в интеграле малых расстояниях (в области локализации $U_S(r)$) для невозмущенной волновой

²⁶⁾ Точное решение уравнения Шрёдингера может быть получено с помощью подстановок, аналогичных использованным в 4.25 б), в).

$$\Psi_{n_r l m}^{(0)}(\mathbf{r}) = R_{n_r l}(r) Y_{lm}(\mathbf{n}), \quad R_{n_r l}(r) \approx Q_{n_r l} r^l \quad \text{при } r \rightarrow 0,$$

выразим интеграл в выражении (1) через длину рассеяния с моментом l на потенциале $U_S(r)$ в борновском приближении (см. 13.28)

$$a_l^B = \frac{\pi m}{2^{2l+1} \Gamma^2(l+3/2) \hbar^2} \int_0^\infty r^{2l+2} U_S(r) dr.$$

Заменяя, наконец, a_l^B на точную длину рассеяния $a_l^{(S)}$ в короткодействующем потенциале $U_S(r)$, приходим к искомой формуле теории возмущений по длине рассеяния для сдвига уровня:

$$\Delta E_{n_r l} = \frac{\hbar^2}{2m} [(2l+1)!!]^2 Q_{n_r l}^2 a_l^{(S)} \quad (2)$$

(здесь использовано, что $2^{l+1} \Gamma(l+3/2) = \sqrt{\pi} (2l+1)!!$; заметим также, что для s -состояний $Q_{n_s}^2 = 4\pi \Psi_{n_s}^2(0)$).

Сделаем несколько замечаний в отношении формулы (2).

1) Так как, вообще говоря, $a_l^{(S)} \propto r_S^{2l+1}$, а $Q_{n_r l}^2 \propto r_L^{-2l}$ — то с увеличением l сдвиги уровней быстро уменьшаются, $\propto (r_S/r_L)^{2l}$, что связано с уменьшением проницаемости центростремительного барьера, разделяющего коротко- и далекодействующие области потенциала.

2) Если с короткодействующим взаимодействием связана возможность протекания неупругих процессов (как, например, аннигиляция в пионы за счет ядерного взаимодействия для pp -ядронного атома, см. также 11.74), то у длины рассеяния $a_l^{(S)}$ появляется мнимая часть. Соответственно теперь $\Delta E_{n_r l}$ описывает не только сдвиг, но и уширение уровня, который становится уже квазистационарным с конечным временем жизни.

Заметим, что возникающая ширина уровня

$$\Gamma_{n_r l} = -2 \operatorname{Im} \Delta E_{n_r l} \propto \operatorname{Im} a_l^{(S)}$$

может быть связана с сечением неупругого рассеяния (с сечением реакций) $\sigma_{r,l}^{(S)}$ в парциальной волне с моментом l за счет короткодействующего взаимодействия для медленных частиц, так как

$$-\operatorname{Im} a_l^{(S)} = \sigma_{r,l}^{(S)}(k)/4(2l+1)\pi k^{2l-1} \Big|_{k \rightarrow 0} \quad (3)$$

(см. [1, § 143]; подчеркнем, что наличие дальнего действующего потенциала может существенно изменить сечение реакций для медленных частиц, см. следующую задачу).

3) Как отмечалось в 11.4, в случае момента $l = 0$ при нарушении неравенства $|a_0^{(S)}| \ll r_L$ формула (2) неприменима. При этом возможны большие сдвиги s -уровней в дальнедействующем потенциале — перестройка спектра, см. также 9.3. В случае $l \neq 0$ ситуация иная и больших сдвигов уровней не возникает, что связано с наличием малопроницаемого центробежного барьера. Однако в случае большой длины рассеяния, $|a_l^{(S)}| \gg r_S^{2l+1}$, когда в потенциале $U_S(r)$ имеется мелкий уровень с моментом l , формула (2) требует модификации. Для выполнения ее заметим, что решение у.Ш. в потенциале $U_S(r)$ для медленных частиц, $kr_S \ll 1$, на расстояниях $r_S \ll r \ll k^{-1}$, r_L имеет вид [1, § 132]

$$R_{kl} \approx C \left[r^l + B_l(k) \frac{1}{r^{l+1}} \right], \quad (4)$$

где

$$B_l^{-1} = \frac{1}{(2l-1)!!(2l+1)!!} k^{2l+1} \operatorname{ctg} \delta_l^{(S)}(k).$$

Нерезонансному случаю, когда $a_l^{(S)} \ll r_S^{2l+1}$, отвечает замена $k^{2l+1} \operatorname{ctg} \delta_l^{(S)}$ на $-1/a_l^{(S)}$, приводящая к формуле (2) для сдвига уровня (при этом ее формальное обоснование может быть получено, как и в 11.4 для момента $l = 0$). Обобщение этой формулы на резонансный случай с учетом разложения эффективного радиуса (XIII. 15) получается заменой $a_l^{(S)}$ множителем²⁷⁾

$$a_l^{(S)} \rightarrow \left[\frac{1}{a_l^{(S)}} - r_l^{(S)} E \right]^{-1}, \quad (5)$$

в котором, вообще говоря, можно положить $E = E_{n_r l}^{(0)}$. При этом для значений $l \neq 0$ независимо от величины $a_l^{(S)}$ второе, сингулярное слагаемое ($\infty 1/r^{l+1}$) в выражении (4) при пере-

²⁷⁾ Ниже $\hbar = m = 1$, так что $E = k^2/2$. Заметим, что выражение (4) можно рассматривать как своеобразное граничное условие на малых расстояниях к у.Ш. с потенциалом $U_L(r)$, связанное с включением короткодействующего потенциала $U_S(r)$, сравнить с 11.4. Однако в случае $l \neq 0$ в нем невозможен переход к пределу $r \rightarrow 0$ из-за возникновения расходимости нормировочного интеграла (так как оно дает $\Psi \propto 1/r^{l+1}$; на малых расстояниях $r \leq r_S$ в.ф. совпадает с в.ф. в короткодействующем потенциале). В случае же $l = 0$ предел $r_S = 0$ возможен и соответствует моделированию короткодействующего потенциала потенциалом нулевого радиуса, см. 4.10.

ходе в область расстояний $r \sim r_L$ оказывается малым, что и требуется для обоснования справедливости формул (2), (5) и соответствующей модификации выражения для сдвига уровня:

$$\Delta E_{n_r l} = \frac{1}{2} [(2l+1)!!]^2 Q_{n_r l}^2 \left(\frac{1}{a_l^{(S)}} - r_l^{(S)} E_{n_r l}^{(0)} \right)^{-1}. \quad (6)$$

4) Существенность условия $l \neq 0$ для справедливости выражения (6) в резонансном случае связана с большой величиной при этом эффективного радиуса, так как $r_l^{(S)} \propto r_S^{1-2l}$ (см. 13.44), обеспечивающей малость сдвига уровня. Указанная замена $E = E_{n_r l}^{(0)}$ в формулах (5), (6) не оправдана лишь в случае, когда

$$E_S^{(0)} \equiv 1/a_l^{(S)} r_l^{(S)} \approx E_{n_r l}^{(0)}, \quad (7)$$

физическая выделенность которого определяется тем, что $E_S^{(0)}$ описывает уровень с моментом l , существующий в изолированном потенциале $U_S(r)$. Таким образом, в условиях выполнения соотношения (7) в системе имеются два близких уровня, связанных как с дальнедействующим, так и короткодействующим потенциалами. Не делая в формуле (6) замены E на $E_{n_r l}^{(0)}$, получаем уравнение для $\Delta E_{n_r l} = E - E_{n_r l}^{(0)}$, решение которого

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left\{ E_S^{(0)} + E_{n_r l}^{(0)} \pm \left[(E_S^{(0)} - E_{n_r l}^{(0)})^2 + \frac{2}{|r_l^{(S)}|} ((2l+1)!!)^2 Q_{n_r l}^2 \right]^{1/2} \right\} \quad (8)$$

дает энергии этих уровней с учетом их взаимодействия. Как видно, оно носит характер *квазипересечения термов*, сравнить с [1, § 79]. В случае $E_S^{(0)} > E_{n_r l}^{(0)}$ первый из корней (8) описывает смещение невозмущенного уровня $E_S^{(0)}$ в потенциале $U_S(r)$ под влиянием дальнедействующего потенциала²⁸⁾ $U_L(r)$, а второй —

²⁸⁾ Строго говоря, при этом воспроизводится лишь часть сдвига, связанная с действием потенциала $U_L(r)$ на больших, $r \gg r_S$, расстояниях. Влияние U_L на малых расстояниях на сдвиг уровня $E_S^{(0)}$ проявляется в так называемой *перенормировке* параметров $a_l^{(S)}$, $r_l^{(S)}$. Так, если $U_L(r) \approx U_0$ для $r \leq r_S$, то более точно заменить E в формуле (5) на $E - U_0$. Такая замена соответствует перенормировке длины рассеяния, т. е. замене $a_l^{(S)}$ на $a_l^{(SL)}$, причем $1/a_l^{(SL)} = 1/a_l^{(S)} + r_l^{(S)} U_0$. Эффективный радиус при этом не перенормируется; см. также 13.42.

смещение уровня $E_{n_r l}^{(0)}$ под влиянием короткодействующего центра $U_S(r)$ (он смещен вниз). В случае $E_S^{(0)} < E_{n_r l}^{(0)}$, наоборот, уже E_1 отвечает смещенному, причем вверх, уровню $E_{n_r l}^{(0)}$.

Обсудим вопрос о виде волновых функций в условиях квази-пересечения уровней. При не слишком близких значениях $E_S^{(0)}$ и $E_{n_r l}^{(0)}$ в случае $E_S^{(0)} > E_{n_r l}^{(0)}$ первому из уровней в (8) отвечает в. ф. $\approx \Psi_S^{(0)}$, локализованная на малых, $r \leq r_S$, расстояниях, а второму — в. ф. $\approx \Psi_{n_r l}^{(0)}$, локализованная на больших, $r \geq r_L$, расстояниях. В случае $E_S^{(0)} < E_{n_r l}^{(0)}$ сопоставляемые уровням волновые функции (в существенной области локализации) меняются местами. В случае же точного резонанса, $E_S^{(0)} = E_{n_r l}^{(0)}$, частица в обоих состояниях 1 и 2 с одинаковой вероятностью, равной $1/2$, находится как в области локализации связанного состояния в потенциале $U_S(r)$ (при $r \leq r_S$), так и в области $r \sim r_L$. В. ф. соответствующих состояний, одинаковые при $r \leq r_S$, отличаются знаком в области $r \gg r_S$, что обеспечивает их ортогональность.

13.37. Для решения данной задачи можно воспользоваться приемом, аналогичным использованному в предыдущей: найти изменение $\Delta\delta_l^{(S)}$ фазы по теории возмущений, выразить его через длину рассеяния на короткодействующем потенциале в борновском приближении и затем заменить ее на точную длину рассеяния $a_l^{(S)}$ в «сильном» потенциале $U_S(r)$. Формальное обоснование такого подхода может быть получено как и в 11.4.

Для определения сдвига $\Delta\delta_l^{(S)}$ под влиянием $U_S(r)$ по теории возмущений запишем два у. Ш. для радиальных волновых функций, $\Psi_{klm} = \chi_{kl} Y_{lm}/r$, непрерывного спектра

$$\begin{aligned} \chi_{kl}^{(0)''} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U_L(r) \right] \chi_{kl}^{(0)} &= 0, \\ \chi_{kl}'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_L(r) + U_S(r)) \right] \chi_{kl} &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Их решения, удовлетворяющие граничному условию $\chi(0) = 0$, имеют следующие асимптотики на больших расстояниях:

$$\begin{aligned} \chi_{kl}^{(0)} &\approx \sin \left(kr \pm \frac{Z}{ka_B} \ln 2kr - \frac{\pi}{2} l + \delta_l^{(L)} \right), \\ \chi_{kl} &\approx \sin \left(kr \pm \frac{Z}{ka_B} \ln 2kr - \frac{\pi}{2} l + \delta_l^{(L)} + \Delta\delta_l^{(S)} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

причем для общности рассматривается случай, когда на больших расстояниях $U_L \approx \mp Ze^2/r$, $a_B = \hbar^2/me^2$; см. [1, § 36].

Умножая первое из уравнений (1) на χ_{kl} , второе — на $\chi_{kl}^{(0)}$, почленно вычитая и интегрируя по r в пределах от 0 до ∞ , с учетом асимптотик (2) получаем

$$k \sin \Delta \delta_l^{(S)} = - \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U_S(r) \chi_{kl}(r) \chi_{kl}^{(0)}(r) dr. \quad (3)$$

Здесь можно заменить: синус — его аргументом, χ_{kl} — на $\chi_{kl}^{(0)}$ и, учитывая короткодействующий характер потенциала U_S , а также соотношение $\chi_{kl}^{(0)} \approx Q_{kl} r^{l+1}$ для $r \rightarrow 0$, получить

$$\Delta \delta_l^{(S)} = - \frac{2m}{\hbar^2 k} Q_{kl}^2 \int_0^\infty r^{2l+2} U_S(r) dr. \quad (4)$$

Интеграл здесь, как и следовало ожидать, выражается через длину рассеяния с моментом l в борновском приближении, см. предыдущую задачу; заменяя ее на точную длину рассеяния, приходим к искомому результату:

$$\Delta \delta_l^{(S)}(k) = - [(2l+1)!!]^2 a_l^{(S)} \frac{Q_{kl}^2}{k}. \quad (5)$$

Рассмотрим некоторые следствия формулы (5).

1) Заметим прежде всего, что в случае $U_L \equiv 0$ имеем

$$\chi_{kl}^{(0)} = \sqrt{\pi k r / 2} J_{l+1/2}(kr).$$

При этом

$$Q_{kl}^2 = k^{2l+2} / [(2l+1)!!]^2,$$

так что

$$\Delta \delta_l^{(S)} = - a_l^{(S)} k^{2l+1}, \quad (6)$$

т. е., как и следует, (6) совпадает с фазой рассеяния $\delta_l^{(S)}$ на изолированном потенциале $U_S(r)$.

2) Такое же соотношение, $\Delta \delta_l^{(S)} = \delta_l^{(S)}$, приближенно имеет место и в том случае, если дальнедействующий потенциал $U_L(r)$ можно рассматривать как возмущение, см. условия (XIII.7). В этом случае фаза рассеяния в потенциале, представляющем суперпозицию $U_S(r) + U_L(r)$, равна сумме фаз рассеяния для каждого из них в отдельности.

3) Обсудим случай далекодействующего кулоновского потенциала, $U_L = \mp Ze^2/r$. При этом (см. [1, § 36])

$$\chi_{kl}^{(0)} = \frac{Zr}{a_B} C_{kl}^{(\mp)} \frac{(2kr)^l}{(2l+1)!} e^{\mp ikr} \times \\ \times F\left(i \frac{Z}{ka_B} + l + 1, 2l + 2, \pm 2ikr\right),$$

$$\delta_l^{(L)} = \arg \Gamma(l + 1 \mp iZ/ka_B),$$

$$C_{kl}^{(\mp)} = 2k' e^{\pm \pi/2k'} \left| \Gamma\left(l + 1 \mp \frac{i}{k'}\right) \right| = \\ = e^{\pm \pi/2k'} \left(\frac{\pi k'}{\text{sh } \pi k'} \right)^{1/2} \prod_{s=1}^l \sqrt{s^2 + \frac{1}{(k')^2}}$$

здесь $k' = ka_B/Z$, так что

$$(Q_{kl}^{(\mp)})^2 = \frac{\pi Z (2k)^{2l+1}}{[(2l+1)!]^2 a_B} \frac{\mp 1}{e^{\mp 2\pi Z/ka_B} - 1} \prod_{s=1}^l \left(s^2 + \left(\frac{Z}{ka_B} \right)^2 \right) \quad (7)$$

(при $l = 0$ произведения заменяются на 1).

В случае «быстрых» частиц, когда $ka_B \gg Z$ (но по-прежнему $kr_s \ll 1$), кулоновский потенциал можно рассматривать как возмущение и из выражений (5), (7) следуют результаты, отмеченные выше в 1) и 2).

Совершенно иная ситуация возникает в случае, когда $ka_B \leq Z$. При этом значения $Q_{kl}^{(\pm)}$ сильно отличаются от невозмущенного, приведенного в 1). В частности, при $ka_B \ll Z$ согласно (5) и (7) для s -волны получаем:

$$a) \Delta \delta_0^{(S)} = \frac{2\pi Z}{ka_B} \delta_0^{(S)}; \quad б) \Delta \delta_0^{(S)} = \frac{2\pi Z}{ka_B} e^{-2\pi Z/ka_B} \delta_0^{(S)} \quad (8)$$

соответственно для кулоновского потенциала притяжения и отталкивания. Существенное изменение величины фазового сдвига — увеличение его в $2\pi Z/ka_B \gg 1$ раз в случае притяжения и экспоненциальное уменьшение при отталкивании — имеет очевидную физическую причину: в случае медленных частиц далекодействующее кулоновское притяжение (отталкивание) сильно увеличивает (уменьшает) вероятность нахождения частицы на малых расстояниях. Отмеченный эффект проявляется и в изменении сечений неупругих процессов, вызываемых короткодействующим взаимодействием, сопровождающих столкновение медленных заряженных частиц.

В заключение отметим, что проведенное рассмотрение предполагает, что рассеяние на короткодействующем потенциале но-

сит нерезонансный характер, т. е. в потенциале $U_s(r)$ нет «мелкого» уровня. При этом $a_l^{(S)} \leq r_S^{2l+1}$ и $\delta_l^{(S)} \approx -a_l^{(S)} k^{2l+1} \ll 1$. Однако с помощью обсуждавшейся в предыдущей задаче замены длины рассеяния $a_l^{(S)}$ выражением

$$\left(\frac{1}{a_l^{(S)}} - \frac{1}{2} k^2 r_l^{(S)} \right)^{-1} \quad (9)$$

формула (5) может быть непосредственно обобщена и на резонансный случай. При этом условием ее применимости является малость $\Delta \delta_l^{(S)} \ll 1$ (что было использовано при преобразованиях выражения (3)). В связи с этим условием заметим, что для отталкивательного дальнедействующего потенциала оно может быть выполнено даже в том случае, когда фаза рассеяния $\delta_l^{(S)}$ на изолированном короткодействующем потенциале $U_s(r)$ не является малой²⁹⁾; сравнить результат (8б) теории возмущений по длине рассеяния для отталкивательного кулоновского потенциала с точным выражением для фазового сдвига из [1, § 138].

13.38. В условиях рассматриваемой задачи амплитуда рассеяния описывается выражением

$$f \approx f_{\text{кул}} + f_{\text{кор}}; \quad f_{\text{кул}} = \pm \frac{Ze^2 m}{2\hbar^2 k^2 \sin^2(\theta/2)}, \quad f_{\text{кор}} = -a_0^{(S)}. \quad (1)$$

Это следует из того, что можно ограничиться влиянием короткодействующего потенциала $U_s(r)$ лишь на частицы с моментом $l=0$ (так как $kr_S \ll 1$) и рассматривать кулоновский потенциал как возмущение (ввиду $Ze^2 \ll \hbar v$). При этом согласно предыдущей задаче фазовый сдвиг в потенциале, представляющем суперпозицию $U_{\text{кул}} + U_s$, равен (приблизительно) сумме сдвигов для каждого из потенциалов в отдельности. Отсюда, учитывая их малость, и приходим к выражению (1).

Дифференциальное сечение рассеяния описывается выражением

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + (a_0^{(S)})^2 \mp \frac{Ze^2 a_0^{(S)}}{mv^2 \sin^2(\theta/2)}. \quad (2)$$

Последнее слагаемое здесь отражает интерференцию амплитуд рассеяния для кулоновского и короткодействующего взаимодействий. Как видно, характер ее зависит от знака длины рассеяния $a_0^{(S)}$.

²⁹⁾ При этом в случае большой длины рассеяния может стать существенной перенормировка параметров низкоэнергетического рассеяния; см. предыдущую задачу, а также 13.42.

13.39. Длина рассеяния a_l может быть найдена по асимптотике радиальной волновой функции $R_{kl}(r)$ для $E = 0$:

$$R_{0l} \approx r^l - \frac{1}{r^{l+1}} \{(2l-1)!!(2l+1)!! a_l\} \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

Это следует, например, из сопоставления выражения для в. ф. в случае медленных частиц на расстояниях $d \ll r \ll 1/k$ (см. [1, § 132], d — радиус потенциала)

$$R_{kl} \approx r^l + B_l(k) \frac{1}{r^{l+1}}, \quad B_l^{-1} = \frac{k^{2l+1} \operatorname{ctg} \delta_l}{(2l-1)!!(2l+1)!!}$$

с разложением эффективного радиуса (XIII. 15).

Приведем окончательные результаты:

а) для рассеяния на непроницаемой сфере

$$a_l = \frac{1}{(2l-1)!!(2l+1)!!} R^{2l+1} \equiv a_{\text{сф. } l}; \quad (1)$$

б) для рассеяния на δ -яме

$$a_l = \frac{\xi}{\xi - 2l - 1} a_{\text{сф. } l}, \quad \xi = \frac{2m\alpha R}{\hbar^2}; \quad (2)$$

в) для рассеяния на прямоугольной потенциальной яме

$$a_l = - \frac{J_{l+3/2}(\lambda)}{J_{l-1/2}(\lambda)} a_{\text{сф. } l}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{2mU_0 R^2}{\hbar^2}}. \quad (3)$$

Обсудить свойства длины рассеяния a_l как функции параметров потенциала (в случаях б) и в)), во многом аналогичные рассмотренным в 13.31 для s -волны, читателю предлагается самостоятельно. Ограничимся лишь замечанием, что в момент возникновения связанного состояния длина рассеяния a_l обращается в бесконечность.

13.40. а) В приближении, соответствующем рассмотрению внешнего электрона как находящегося в потенциале нулевого радиуса, имеем (см. 13.20 и 4.10):

$$a_0 = \kappa_0^{-1} = (2\epsilon_0)^{-1/2} = 4,25 \quad (1)$$

(в атомных единицах).

б) Рассматривая внешний электрон иона как слабосвязанный в потенциале конечного радиуса r_s , прежде всего воспользуемся связью эффективного радиуса взаимодействия r_0 с асимптотическим коэффициентом (см. [1, § 133]):

$$r_0 = (C_{\kappa 0}^2 - 1) / \kappa_0 C_{\kappa 0}^2.$$

Теперь, имея в виду разложение эффективного радиуса (XIII. 15) и то обстоятельство, что амплитуда рассеяния как функция энергии имеет полюс при $E = -\varepsilon_0$ (при этом в полюсе $k \operatorname{ctg} \delta_0 = ik = -\kappa_0$), находим

$$a_0 = \frac{2C_{\kappa_0}^2}{\kappa_0(1 + C_{\kappa_0}^2)} = 6,17. \quad (2)$$

Как видно, поправка на эффективный радиус существенно сказывается на значении длины рассеяния. Это связано с тем, что в данном случае $\kappa_0 r_s \approx 0,6$ не так уже и мало. В связи с этим отметим роль следующего, $\propto k^4$, члена в правой части разложения эффективного радиуса (XIII. 15). Его обычно записывают как

$$-Pr_0^3 k^4, \quad (3)$$

где P — так называемый *параметр формы*. Как правило, числовое значение этого параметра мало, $|P| \leq 0,1$, см. [23]. С учетом этого замечания следует ожидать, что величина длины рассеяния (2) определена с точностью порядка нескольких процентов.

13.41. В пренебрежении эффективным радиусом взаимодействия

$$a_0(3) = \kappa_0^{-1} = (\hbar^2/2\mu\varepsilon_0)^{1/2} = 4,3 \cdot 10^{-13} \text{ см}, \quad (1)$$

где $\mu \approx m_p/2$ — приведенная масса рп-системы. Так как радиус действия ядерных сил $r_s \sim 10^{-13}$ см, то $\kappa_0 r_s \sim 0,3$. Такую же точность, $\approx 20\%$, имеет полученный результат (1). Учет слагаемого с эффективным радиусом в разложении (XIII. 15) воспроизводит экспериментальное значение триплетной длины рассеяния, сравнить с предыдущей задачей.

13.42. а) В пренебрежении эффективным радиусом взаимодействия получаем (сравнить с 13.20 и 4.10, а также с 13.40):

$$\varepsilon_{\text{вирт}} \approx \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2(1)} = 56 \text{ кэВ},$$

здесь $\mu = m_p/2$ — приведенная масса рп-системы.

б) Так как кулоновское взаимодействие на малых расстояниях примерно на два порядка слабее ядерного, то, на первый взгляд, следовало ожидать, что отличие параметров низкоэнергетического рассеяния для рр-системы от параметров рп-системы будет в пределах нескольких процентов. Это действительно так в отношении значений эффективных радиусов взаимодействия.

Длины рассеяния различаются существенно: в 3 раза. Это, однако, не означает сильного нарушения изотопической

инвариантности ядерного взаимодействия нуклонов, так как может быть объяснено кулоновским взаимодействием в рр-системе. Дело в том, что в рп-системе имеется мелкий виртуальный уровень и длина рассеяния велика (примерно в 20 раз больше радиуса взаимодействия!), а в таких условиях она является резкой функцией параметров потенциала, см. 13.31, и сильно изменяется уже при небольшом изменении потенциала (в данной задаче — за счет кулоновского взаимодействия).

Приведем простую оценку рассматриваемого эффекта — *перенормировки* длины рассеяния. Запишем потенциал рп-взаимодействия в виде $U_{рп} = U_0(r) + \delta U(r)$, где $U_0(r)$ отвечает моменту появления связанного состояния; при этом $\delta U(r) \geq 0$, так как уровень в рп-системе виртуальный. Для рр-системы, считая протоны точечными, имеем $U_{рр} = U_0 + \delta U + e^2/r$. Воспользовавшись теперь результатом задачи 4.27 для глубины залегания мелкого s-уровня, находим

$$\kappa_{рп} = - \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^d \left(\delta U(r) + \frac{e^2}{r} \right) \chi_0^2(r) dr. \quad (1)$$

Здесь $\chi_0(r)$ — волновая функция ($\chi = rR$) в момент возникновения уровня, нормированная условием $\chi_0(r) = 1$ вне области действия потенциала. Верхний предел интегрирования $d \sim a_B = \hbar^2/m_p e^2 \approx 29 \cdot 10^{-13}$ см (на больших расстояниях вклад кулоновского взаимодействия учитывается уже независимым образом и представлен в амплитуде кулоновского рассеяния протонов). Интеграл с $\delta U(r)$ в выражении (1) определяет значение $\kappa_{рп}$ (в обеих системах $\kappa < 0$, так как уровни — виртуальные). Для оценки интеграла с кулоновским потенциалом положим в нем $\chi_0^2(r) = 1$. При этом из-за возникновения расходимости на нижнем пределе введем «обрезание» на расстоянии $r_s \approx 10^{-13}$ см (порядка радиуса ядерного взаимодействия). Учитывая, наконец, соотношения $\kappa_{рп} = 1/a_0^{рп}$ (1) и $\kappa_{рр} = 1/a_0^{рр}$ (1), согласно (1) получаем

$$\frac{1}{a_0^{рр}} - \frac{1}{a_0^{рп}} \approx - \frac{1}{a_B} \ln \left(\frac{a_B}{r_0} \right) \quad (2)$$

(здесь вместо r_s мы подставили эффективный радиус взаимодействия r_0 ; подчеркнем, что имеющаяся неопределенность в значениях параметров d и r_s , для которых $d/r_s \gg 1$, в окончательном результате (2) «сглаживается» тем, что они входят под логарифмом). Теперь нетрудно убедиться, что учет «слабого» кулоновского взаимодействия протонов естественным образом объясняет существенное различие длин рассеяния для рп- и рр-систем.

13.43. Обозначим через χ_0 и χ радиальные волновые функции для значений энергии $E = 0$ и $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Для них

$$\chi_0'' - \tilde{U}(r) \chi_0 = 0, \quad \chi'' - [\tilde{U}(r) - k^2] \chi = 0; \quad \tilde{U} = \frac{2m}{\hbar^2} U(r). \quad (1)$$

Нормируем $\chi_0(r)$ условием $\chi_0(r) \approx (1 - r/a_0)$ для $r \gg d$ (d — радиус потенциала). Для в. ф. $\chi(r)$ на расстояниях $d \ll r \ll 1/k$ имеем (сравнить с [1, § 132])

$$\chi(r) = k \operatorname{ctg} \delta_0 \cdot r [1 + O(k^2 r^2)] + [1 + O(k^2 r^2)], \quad (2)$$

где $O(k^2 r^2)$ соответствует поправочным членам в асимптотике.

Умножая первое из уравнений (1) на χ , второе — на χ_0 , почленно вычитая одно из другого и интегрируя в пределах от 0 до значения r , для которого справедливо разложение (2), получаем

$$-\frac{1}{2} r_0 k^2 + O\left(k^2 r, k^2 \frac{r^2}{a_0}, k^2 \frac{r^3}{a_0^2}\right) = k^2 \int_0^r \chi(r) \chi_0(r) dr. \quad (3)$$

Здесь в левой части соотношения учтены указанные выше асимптотики волновых функций, граничное условие $\chi(0) = 0$ и разложение эффективного радиуса (XIII. 15). Интеграл справа преобразуем следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_0^r \chi \chi_0 dr &\approx \int_0^r \left[\chi_0^2 \pm \left(-\frac{r}{a_0} + 1 \right)^2 \right] dr = \\ &= \int_0^r \left[\chi_0^2 - \left(-\frac{r}{a_0} + 1 \right)^2 \right] dr + \frac{r^3}{3a_0^2} - \frac{r^2}{a_0} + r \end{aligned}$$

(здесь использовано, что $\chi \approx \chi_0$; запись $\pm (-r/a_0 + 1)^2$ означает добавление и вычитание соответствующего слагаемого). В последнем интеграле уже можно распространить интегрирование до бесконечности, после чего, оставляя в выражении (3) лишь не зависящие от r слагаемые, получаем

$$r_0 = 2 \int_0^{\infty} \left\{ \left(-\frac{r}{a_0} + 1 \right)^2 - \chi_0^2(r) \right\} dr. \quad (4)$$

Для рассеяния на непроницаемой сфере радиуса R имеем $\chi_0 = 1 - r/R$ при $r > R$ и $\chi_0 = 0$ при $r < R$; при этом длина рассеяния $a_0 = R$ и согласно (4) находим эффективный радиус взаимодействия $r_0 = \frac{2}{3} R$.

При $a_0 = \infty$ из выражения (4) следует известный результат для эффективного радиуса r_0 в момент возникновения s -уровня [1, § 133]. В частности, в этом случае для рассеяния на δ -яме имеем $\chi_0 = 1$ при $r > R$ и $\chi_0 = r/R$ при $r < R$; согласно (4) с $a_0 = \infty$ получаем $r_0 = \frac{4}{3}R$. Для рассеяния на прямоугольной потенциальной яме $r_0 = R$ — эффективный радиус одинаков в момент появления любого по счету связанного состояния (теперь при $r < R$ в. ф.).

$$\chi_0 = \sin [\pi (n_r + 1/2) r/R],$$

где $n_r = 0, 1, 2, \dots$ в порядке появления s -уровней при углублении ямы).

Подчеркнем в заключение, что установленные для рассеяния на потенциальных ямах свойства эффективного радиуса r_0 в момент возникновения связанного s -состояния: величина $r_0 \sim R$ и знак $r_0 > 0$ являются достаточно общими для потенциалов притяжения $U(r) \leq 0$; сравнить со случаем моментов $l \neq 0$ в 13.44, а также случаем $l = 0$ для ямы, окруженной потенциальным барьером, в 11.47.

13.44. Поступим как и при решении предыдущей задачи. Учитывая, что теперь волновая функция в момент возникновения уровня имеет вид $\chi_l^{(0)} = C_l r^{-l}$ при $r \gg d$, а также соотношение

$$\chi_{kl} \approx C_l \left[r^{-l} + \frac{k^{2l+1} \operatorname{ctg} \delta_l}{(2l-1)!! (2l+1)!!} r^{l+1} \right], \quad d \ll r \ll 1/k$$

(сравнить, например, с 13.39), находим

$$-\frac{1}{[(2l-1)!!]^2} C_l^2 k^{2l+1} \operatorname{ctg} \delta_l = k^2 \int_0^r \chi_{kl} \chi_l^{(0)} dr, \quad d \ll r \ll 1/k.$$

Отсюда, заменяя ввиду малости k^2 в правой части χ_{kl} на $\chi_l^{(0)}$, распространяя интегрирование до бесконечности (в случае $l = 0$ этого нельзя сделать ввиду расходимости интеграла на верхнем пределе) и используя соотношение $k^{2l+1} \operatorname{ctg} \delta_l = r_l k^2/2$ (так как $a_l = \infty$ в момент появления связанного состояния), получаем

$$r_l = -2 [(2l-1)!!]^2 C_l^{-2}, \quad l \geq 1. \quad (1)$$

При этом значение C_l^2 однозначно определяется условием нормировки радиальной в. ф. χ_l^0 на 1.

Как видно, теперь, в отличие от случая s -рассеяния, эффективный радиус взаимодействия отрицателен, $r_l < 0$ и по порядку величины $|r_l| \sim R^{1-2l}$, где R — радиус потенциала (такого же

порядка и размер области локализации волновой функции связанного состояния с моментом $l \neq 0$ и энергией $E = 0$).

Для δ -ямы в. ф. в момент возникновения связанного состояния с моментом l имеет вид

$$\chi_l^{(0)} = \begin{cases} C_l r^{-l}, & r > R, \\ C_l r^{l+1}/R^{2l+1}, & r < R. \end{cases}$$

Из условия нормировки находим C_l^2 и эффективный радиус взаимодействия

$$r_l = - \frac{4(2l-3)!!(2l+1)!!}{2l+3} R^{1-2l}, \quad l \geq 1.$$

В заключение подчеркнем, что при небольшом изменении потенциала эффективный радиус изменяется также незначительно. Поэтому значение r_l в момент возникновения связанного состояния применимо и в случае, когда уровень является мелким (реальным или квазидискретным).

13.45. а) У. Ш. для радиальной функции $\chi_l = rR_l$ в случае $l = 0$ и его решение, удовлетворяющее граничному условию $\chi_l(R) = 0$, имеют вид

$$\chi_0'' + k^2 \chi_0 = 0, \quad \chi_0(r) = A \sin [k(r - R)].$$

Отсюда фаза s -рассеяния $\delta_0(k) = -kR$ и сечение рассеяния медленных частиц, когда $kR \ll 1$, описывается выражением

$$\sigma \approx \sigma_{l=0}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \approx 4\pi R^2 \left(1 - \frac{1}{3} k^2 R^2\right)$$

(напомним, что поправка к сечению, связанная с рассеянием в p -волне, $\propto k^4$; вклад более высоких волн еще менее существен).

В случаях б) и в) также можно было бы найти $\delta_0(k)$ из точного решения у. Ш. Однако более просто рассеяние медленных частиц может быть рассмотрено на основе разложения эффективного радиуса (XIII.15). При этом параметры низкоэнергетического рассеяния a_l и r_l могут быть получены с помощью решения у. Ш. для энергии $E = 0$; см. 13.31 и 13.43 для s -рассеяния.

б) Решение у. Ш. при $E = 0$ и $l = 0$ имеет вид

$$\chi_0(r) = \begin{cases} r - a_0, & r > R, \\ Cr, & r < R. \end{cases}$$

Сшивание решения в точке $r = R$, см. 2.6, дает

$$a_0 = \frac{\bar{a}R}{\bar{a} - 1}, \quad C = 1 - \frac{a_0}{R}, \quad \bar{a} = \frac{2maR}{\hbar^2}.$$

Если $\tilde{\alpha}$ не близко к 1, то $|a_0| \leq R$ и для медленных частиц $\sigma \approx 4\pi a_0^2$ (поправку порядка $k^2 R^2$ к этому выражению можно найти, вычислив эффективный радиус r_0 согласно 13.43). Если же $\tilde{\alpha}$ близко к 1, то $|a_0| \gg R$ и сечение рассеяния имеет резкую энергетическую зависимость, описываемую резонансной формулой (XIII. 16), при этом эффективный радиус взаимодействия для δ -ямы в момент возникновения связанного s -состояния $r_0 = \frac{4}{3} R$, см. 13.43. Отметим, что соотношение $\sigma \approx 4\pi a_0^2$ требует уточнения также при значениях параметра $\tilde{\alpha}$, близких к $2l + 1$ с $l \geq 1$ (когда в системе появляется связанное состояние с орбитальным моментом l), ввиду резонансного характера рассеяния в l -й парциальной волне, см. 13.46.

в) Параметры низкоэнергетического рассеяния a_0 и r_0 для прямоугольной потенциальной ямы были найдены в 13.31 и 13.43.

13.46. Как и в предыдущей задаче, воспользуемся разложением эффективного радиуса (XIII. 15). Длина рассеяния

$$a_l = - \frac{1}{(2l-1)!!(2l+1)!!} \frac{\tilde{\alpha}}{2l+1-\tilde{\alpha}} R^{2l+1}, \quad \tilde{\alpha} = \frac{2maR}{\hbar^2} \quad (1)$$

была вычислена в 13.39. Пока $\tilde{\alpha}$ не близко к $2l + 1$, рассеяние в l -й парциальной волне носит нерезонансный характер, при этом для медленных частиц

$$\sigma_l \approx 4\pi(2l+1) a_l^2 k^{4l}$$

и доминирующим является s -рассеяние.

Если же $\tilde{\alpha}$ близко к $2l + 1$, то в потенциале имеется мелкий *реальный* (при $\tilde{\alpha} > 2l + 1$) или *квазидискретный*³⁰⁾ (в случае $\tilde{\alpha} < 2l + 1$) уровень. При этом рассеяние носит резонансный характер и существен член с эффективным радиусом, равным, согласно 13.44,

$$r_l \approx -4(2l-3)!!(2l+1)!! R^{1-2l}/(2l+3). \quad (2)$$

Энергетический спектр системы определяется полюсами парциальной амплитуды рассеяния $f_l(E) = 1/k(\text{ctg } \delta_l - i)$. В полюсе E_l имеем $\text{ctg } \delta_l(E_l) = i$ и с помощью разложения эффективного радиуса (XIII. 15) для «мелких» уровней получаем уравнение

$$ik_R^{2l+1} = -\frac{1}{a_l} + \frac{1}{2} r_l k_R^2. \quad (3)$$

В случае $l \geq 1$ величина левой части этого уравнения мала по сравнению с каждым из слагаемых в правой части уравне-

³⁰⁾ Так как $l \geq 1$; s -уровень при $\tilde{\alpha} < 1$ является *виртуальным*.

ния, так что это можно решать последовательными итерациями. В «нулевом» приближении, пренебрегая левой частью в уравнении (3), получаем

$$E_R \approx \frac{\hbar^2}{m r_l a_l} \approx \frac{(2l-1)(2l+3)(2l+1-\bar{\alpha})}{4(2l+1)} \frac{\hbar^2}{m R^2}. \quad (4)$$

Так как $r_l < 0$ (для $l \geq 1$), то в случае $a_l > 0$ (т. е. при $\bar{\alpha} > (2l+1)$) имеем $E_R < 0$, так что этот уровень отвечает связанному состоянию в δ -яме (сравнить с 4.9). При рассеянии медленных частиц в этом случае $f_l \approx (k \operatorname{ctg} \delta_l)^{-1}$, а соответствующее парциальное сечение рассеяния

$$\sigma_l(E) = 4\pi(2l+1) |f_l|^2 \approx 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^4}{m^2 r_l^2} \frac{k^{4l}}{(E + |E_R|)^2}. \quad (5)$$

Как видно, $\sigma_l \propto (kR)^{4(l-1)} R^2$, т. е. в этом случае резонансное сечение в l -й парциальной волне по порядку величины совпадает с нерезонансным сечением в более низкой парциальной волне с моментом, равным $l-1$. Поэтому, кроме случая $l=1$, оно вносит малый вклад в полное сечение рассеяния.

В случае $a_l < 0$ (т. е. для значений $\bar{\alpha} < 2l+1$, $l \geq 1$) ситуация иная. Теперь, согласно (4), $E_R > 0$ и левая часть уравнения (3) является мнимой. Следующая итерация позволяет получить мнимую часть полюса амплитуды, $E_l = E_R - i\Gamma_R/2$, определяющую ширину рассматриваемого квазистационарного состояния,

$$\Gamma_R \approx \frac{2\hbar^2}{m |r_l|} k_R^{2l+1} \sim (k_R R)^{2l+1} \frac{\hbar^2}{m R^2}, \quad k_R = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_R}. \quad (6)$$

Заметим, что зависимость Γ_R от k_R определяется энергетической зависимостью коэффициента прохождения центробежного барьера:

$$\begin{aligned} \Gamma_R \propto D_l \sim \exp \left\{ -2 \int_R^b \sqrt{\frac{(l+1/2)^2}{r^2} - k_R^2} dr \right\} \sim \\ \sim \exp \left\{ -(2l+1) \ln \frac{l+1/2}{k_R R} \right\} \propto (k_R R)^{2l+1} \end{aligned}$$

($b = (l+1/2)/k_R$ — квазиклассическая точка поворота), сравнить с 9.30.

Теперь парциальное сечение рассеяния $\sigma_l(E)$ в узкой области, шириной $\sim \Gamma_R$, энергий, близких к E_R , описывается выражением

$$\sigma_l(E) \approx \frac{\pi(2l+1)}{k^2} \frac{\Gamma_R^2}{(E - E_R)^2 + \Gamma_R^2/4}. \quad (7)$$

Как видно, оно велико, $\sigma_l \sim k_R^{-2} \gg R^2$, и значительно превышает сечение рассеяния в s -волне ($\sigma_0 \sim \pi R^2$), так что полное сечение $\sigma \approx \sigma_l$. Вне этой области энергий, при $|E - E_R| \gg \Gamma_R$, сечение описывается аналогичным (5) выражением, с заменой в нем $(E + |E_R|)^2$ на $(E - E_R)^2$; соответственно приведенная выше оценка сечения рассеяния при $a_l > 0$ переносится и на рассматриваемый случай $a_l < 0$.

13.47. Для решения задачи воспользуемся разложением эффективного радиуса и вычислим параметры низкоэнергетического рассеяния a_0 и r_0 . Волновая функция $\chi_0 = rR_0(r)$ для значений $E = 0$ и $l = 0$ имеет вид

$$\chi_0(r) = \begin{cases} C \sin \kappa_0 r, & r < R; & \kappa_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0}, \\ 1 - r/a_0, & r > R. \end{cases}$$

Из условий сшивания решения в точке $r = R$, см. 2.6, получаем

$$C \sin \lambda = 1 - \frac{R}{a_0}, \quad \frac{R}{a_0} + \lambda C \cos \lambda = \tilde{\alpha} \left(\frac{R}{a_0} - 1 \right), \quad (1)$$

где $\lambda = \kappa_0 R$ и $\tilde{\alpha} = 2m\alpha R/\hbar^2$. Отсюда находим длину рассеяния

$$a_0 = R \left(1 - \frac{1}{\tilde{\alpha} + \lambda \operatorname{ctg} \lambda} \right). \quad (2)$$

При выполнении неравенств $\tilde{\alpha} \gg 1$ и $\tilde{\alpha} \gg \lambda$ имеем, вообще говоря, $a_0 \approx R$, что соответствует длине рассеяния на непроницаемой сфере радиуса R (физически естественный результат ввиду малой проницаемости барьера).

Существенное отличие от рассеяния на непроницаемой сфере возникает при такой глубине ямы U_0 , когда λ близко к $n\pi$ с $n = 1, 2, \dots$. Записав в этом случае $\lambda = n\pi + \gamma$, где $|\gamma| \ll 1$, получаем

$$a_0 \approx R \left[1 - \frac{1}{\tilde{\alpha} + n\pi/\gamma} \right]. \quad (3)$$

Как видно, когда $\tilde{\alpha} \approx \tilde{\alpha}_{0,n} = -n\pi/\gamma$, длина рассеяния уже велика, $|a_0| \gg R$, и обращается в бесконечность при $\tilde{\alpha} = \tilde{\alpha}_{0,n}$. Такие значения параметров потенциала соответствуют появлению в системе уровня с энергией $E = 0$ (n -го по счету) при углублении ямы. В случае $|a_0| \gg R$ рассеяние медленных частиц носит резонансный характер.

Вычислим эффективный радиус r_0 . Согласно (1) при значениях параметра $\lambda \approx n\pi$ имеем $C \approx (-1)^{n+1} \tilde{\alpha}/n\pi$ и по формуле для

эффективного радиуса r_0 в момент возникновения s -уровня

$$r_0 = 2 \int_0^{\infty} (1 - \chi_0^2(r)) dr, \quad \chi_0 = 1 \quad \text{при } r \rightarrow \infty$$

(сравнить с 13.43 для случая $a_0 = \infty$), находим

$$r_0 = R(2 - C^2) \approx -C^2 R \approx -\left(\frac{\tilde{a}}{n\pi}\right)^2 R. \quad (4)$$

Теперь, в отличие от случая s -рассеяния ямой без барьера (когда $r_0 \sim R$ и $r_0 > 0$, см. 13.43), эффективный радиус в момент возникновения связанного состояния велик, $|r_0| \gg R$, и отрицателен, $r_0 < 0$. Это приводит к тому, что слагаемое с эффективным радиусом в (XIII.15) является существенным³¹⁾ при описании резонансного s -рассеяния. Ситуация аналогична имеющей место при рассеянии с отличным от нуля орбитальным моментом частицы, а физическая причина этого связана с наличием малопроницаемого δ -барьера, играющего при $l = 0$ такую же роль, как центробежный барьер при $l \neq 0$.

Амплитуда резонансного рассеяния

$$f \approx f_0 = \frac{1}{-\frac{1}{a_0} + \frac{1}{2} r_0 k^2 - ik}, \quad (5)$$

как и сечение рассеяния, $\sigma \approx 4\pi |f_0|^2$, имеет резкую энергетическую зависимость, характер которой зависит от соотношения между тремя малыми параметрами $kR \ll 1$, $R/|a_0| \ll 1$, $R/|r_0| \ll 1$. Ограничимся анализом двух случаев.

1) Если $|a_0| \gg |r_0|$, то

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{\left(\frac{1}{a_0}\right)^2 + k^2 + \frac{1}{4} r_0^2 k^4}, \quad (6)$$

так что сечение рассеяния (почти) не зависит от знака длины рассеяния. При этом в области значений $k \ll 1/|r_0|$ слагаемое с эффективным радиусом, как и в обычном случае s -рассеяния, выступает как поправка; оно начинает играть существенную роль при $k > 1/|r_0|$.

2) В случае $|a_0| \ll |r_0|$ рассеяние существенно зависит от знака длины рассеяния. При этом для значений $a_0 > 0$ имеем

³¹⁾ Заметим, что соотношение $|r_0| \gg R$ имеет место лишь в условиях существования «мелкого» уровня в системе.

(в знаменателе выражения (5) можно пренебречь слагаемым $-ik$)

$$\sigma(E) \approx 4\pi \left(\frac{\hbar^2}{mr_0} \right)^2 \frac{1}{(E + \epsilon)^2}, \quad \epsilon = -\frac{\hbar^2}{ma_0 r_0}. \quad (7)$$

Аналогичной формулой (но уже с $\epsilon \equiv -E_R < 0$) описывается сечение и в случае $a_0 < 0$, исключая узкую область значений энергии ³²⁾ $|E - E_R| \sim \Gamma_R$, в которой

$$\sigma(E) \approx \frac{\pi}{k_R^2} \frac{\Gamma_R^2}{(E - E_R)^2 + \Gamma_R^2/4}, \quad (8)$$

$$\Gamma_R = \frac{2\hbar^2 k_R}{m|r_0|} = \frac{2(n\pi\hbar)^2 k_R}{m\bar{\alpha}^2 R}. \quad (9)$$

Параметры E_R и Γ_R определяют положение и ширину квазидискретного уровня, существующего в системе в рассматриваемом случае; значение ширины связано с проникаемостью δ -барьера, сравнить с предыдущей задачей, а также с 13.48.

В заключение рекомендуем читателю обсудить вопрос о полюсах амплитуды рассеяния (5) и о связи энергетической зависимости сечения рассеяния (6)–(8) с характером уровня (реальный, виртуальный или квазистационарный).

13.48. У. Ш. и его решение для s -волны имеют вид

$$\chi'' - \bar{\alpha}\delta(r - R)\chi + k^2\chi = 0; \quad \bar{\alpha} = 2ma/\hbar^2,$$

$$\chi(r) = \begin{cases} A \sin kr, & r < R \\ (S_0 e^{ikr} - e^{-ikr}), & r > R. \end{cases}$$

Из условия сшивания в. ф. в точке $r = R$, см. 2.6, находим

$$S_0 = e^{2i\delta_0} = e^{-2ikR} \frac{\bar{\alpha}R \sin kR + kR \cos kR + ikR \sin kR}{\bar{\alpha}R \sin kR + kR \cos kR - ikR \sin kR}. \quad (1)$$

При выполнении условий $\bar{\alpha}R \gg 1$ и $kR \sim 1$ (точнее, $kR \ll \bar{\alpha}R$), из (1) имеем, вообще говоря, $S_0 \approx e^{-2ikR}$, т. е. $\delta_0 \approx \approx -kR$, что соответствует рассеянию на непроницаемой сфере (см. 13.45).

Специального рассмотрения требует при этом случай таких энергий частицы, для которых $kR \approx n\pi$ с $n = 1, 2, \dots$, и в выражении (1) нельзя заменять дробный множитель на 1. Записав

³²⁾ В которой вещественная часть знаменателя в выражении (5) близка к нулю.

$kR = n\pi + \gamma$ с $|\gamma| \ll 1$, имеем

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}R \sin kR + kR \cos kR - ikR \sin kR &\approx (-1)^n (\bar{\alpha}R\gamma + n\pi - in\pi\gamma) \approx \\ &\approx (-1)^n (\bar{\alpha}R - in\pi) (kR - n\pi + \lambda + i\lambda^2), \end{aligned}$$

где $\lambda = n\pi/\bar{\alpha}R \ll 1$, и выражение (1) оказывается равным

$$S_0 \approx e^{-2ikR} \frac{kR - n\pi + \lambda - i\lambda^2}{kR - n\pi + \lambda + i\lambda^2}. \quad (2)$$

Умножив здесь числитель и знаменатель на

$$(kR + n\pi - \lambda) \frac{\hbar^2}{2mR^2} \approx \frac{n\pi\hbar^2}{mR^2},$$

преобразуем выражение (2) к более удобной форме

$$S_0 \approx e^{2i\delta_0^{(0)}} \frac{E - E_{R,n} - i\Gamma_{R,n}/2}{E - E_{R,n} + i\Gamma_{R,n}/2}, \quad (3)$$

где $\delta_0^{(0)} = -kR$ и

$$E_{R,n} = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2mR^2} \left(1 - \frac{2}{\bar{\alpha}R}\right), \quad \Gamma_{R,n} = \frac{2\pi^2 n^2 \hbar^2}{mR^2} \frac{n\pi}{(\bar{\alpha}R)^2} \ll E_{R,n}.$$

Выражение (3) имеет обычный для случая резонансного рассеяния на квазидискретном уровне вид, см. [1, § 134]. При этом $\delta_0^{(0)}(k)$ описывает фазу *потенциального* рассеяния (т. е. фазу вдали от резонанса), а $E_{R,n}$ и $\Gamma_{R,n}$ определяют положение и ширину квазидискретного уровня. Таким образом:

- 1) фаза потенциального рассеяния совпадает с фазой рассеяния на непроницаемой сфере радиуса R ;
- 2) положение $E_{R,n}$ квазидискретных уровней почти совпадает с уровнями в бесконечно глубокой яме радиуса R ;
- 3) ширина уровня, определяющая время жизни квазистационарного состояния, может быть представлена в виде

$$\Gamma_{R,n} = \frac{\hbar}{\tau_n} \equiv \hbar DN = \hbar \cdot 4\lambda^2 \cdot \frac{\pi n \hbar}{2mR^2},$$

где D — коэффициент проницаемости (при однократном столкновении) δ -барьера при энергии, равной $E_{R,n}$ (см. 2.30), а $N = v/2R = \pi n \hbar / 2mR^2$ характеризует число ударов частицы о «стенку» в единицу времени.

Из физических соображений следует ожидать, что аналогичные результаты имеют место и для значений момента $l \neq 0$. Поэтому при значениях $kR \ll \bar{\alpha}R$ сечение рассеяния на δ -сфере почти совпадает с сечением рассеяния на непроницаемой сфере такого же радиуса, за исключением узких областей ΔE вблизи

положений квазидискретных уровней. Так как парциальное сечение описывается выражением

$$\sigma_l = 4\pi (2l + 1) \frac{1}{k^2} |S_l - 1|^2$$

и при энергии частицы, близкой к резонансной энергии $E_{R, n}$ для s -уровней, рассеяния с моментом $l = 0$ на непроницаемой сфере не происходит (при этом $\delta_0^{(0)} \approx n\pi$), то разность сечений

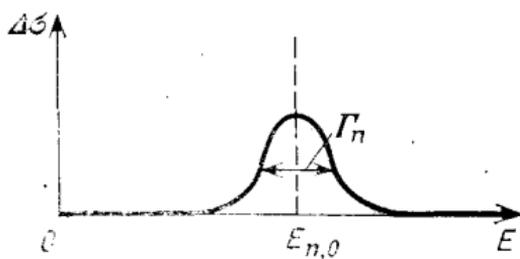


Рис. 49

рассеяния на δ - и непроницаемой сферах в окрестности квазидискретного s -уровня оказывается равной (рис. 49)

$$\Delta\sigma = \pi R^2 \Gamma_{R, n}^2 / n^2 \pi^2 \left[(E - E_{R, n})^2 + \frac{1}{4} \Gamma_{R, n}^2 \right] > 0.$$

13.49. Обозначим через $\chi_l^{(0)}$ и χ_l регулярные решения уравнения Шрёдингера ($\chi = rR$) с нулевой энергией в потенциалах $U_0(r)$ и $U_0(r) + \delta U(r)$, нормированные условиями

$$\chi_l^{(0)} = r^{-l} \text{ и } \chi_l = r^{-l} - r^{l+1} \{(2l-1)!! (2l+1)!! a_l\}^{-1} \text{ при } r \rightarrow \infty$$

(сравнить с 13.39). Написав у. Ш. для $\chi_l^{(0)}$ и χ_l , умножив первое из них на χ_l , а второе — на $\chi_l^{(0)}$ и вычтя почленно, проинтегрируем по r в пределах от 0 до ∞ ; в результате получим

$$\frac{\hbar^2}{2 [(2l-1)!!]^2 m a_l} = - \int_0^\infty \delta U \chi_l \chi_l^{(0)} dr \approx - \int_0^\infty \delta U (\chi_l^{(0)})^2 dr \quad (1)$$

(сравнить с аналогичным преобразованием в 13.31; подчеркнем, что соотношение (1) справедливо при любом значении момента частицы).

Используя полученный результат и разложение эффективного радиуса (XIII.15), из условия $\text{ctg } \delta_l(E_l) = i$ можно найти положение полюса парциальной амплитуды рассеяния, определяющего изменение уровня $E_l^{(0)} = 0$ в потенциале $U_0(r)$ под влия-

нием возмущения $\delta U(r)$. В случае момента частицы $l = 0$ имеем

$$\kappa_0 = -i \sqrt{2mE_0/\hbar^2} \approx 1/a_0$$

и для значений длины рассеяния $a_0 > 0$ (при $\delta U < 0$) приходим к известному результату

$$E_0 \approx -\frac{2m}{\hbar^2} \left[\int_0^\infty \delta U (\chi_0^{(0)}(r))^2 dr \right]^2 \quad (2)$$

о квадратичной зависимости, $E_0 \propto -(\delta U)^2$, от δU глубины «залегания» s -уровня, сравнить с 4.27. В случае $a_0 < 0$ также и $\kappa_0 < 0$, так что уровень E_0 является виртуальным (находится на нефизическом листе). Подчеркнем, что сечение s -рассеяния слабо зависит от знака $\Delta U(r)$, см. (XIII. 16).

В случае орбитального момента частицы $l \neq 0$, воспользовавшись выражением (1) и результатом 13.44 для эффективного радиуса взаимодействия r_l в момент возникновения связанного состояния, замечаем, что сдвиг уровня (полюса парциальной амплитуды)

$$E_l \approx -\hbar^2/ma_l |r_l|, \quad l \geq 1 \quad (3)$$

линеен по δU и описывается первым порядком теории возмущений, сравнить с 4.28. Для значений $a_l > 0$ уровень — реальный с $E_l < 0$. Если же $a_l < 0$, то $E_l > 0$ определяет энергию квазистационарного состояния; при этом его ширина

$$\Gamma_l \approx \frac{2\hbar^2}{m|r_l|} \left(\frac{2mE_l}{\hbar^2} \right)^{l+1/2}. \quad (4)$$

В случае $l \neq 0$ характер резонансного рассеяния существенно зависит от знака $\delta U(r)$, определяющего характер уровня, см., например, 13.46.

13.50. Общее выражение для членов разложения, $f = \sum_n f^{(n)}$,

амплитуды рассеяния по степеням кратности взаимодействия дается формулой (2) из 13.10. Так как входящие в нее фурье-компоненты потенциала $\tilde{U}(\kappa)$ существенно отличны от нуля лишь при значениях $\kappa R \leq 1$ (R — радиус потенциала), то замечаем, что в случае быстрых частиц, $kR \gg 1$, и малых углов рассеяния, когда $qR = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|R \leq 1$, в интегралах по κ_k в этой формуле доминирующую роль играют области интегрирования, в которых $|\kappa_k - \mathbf{k}_0| \leq 1/R$. Записав

$$\kappa_k = \mathbf{k}_0 + \tilde{\kappa}_k^\parallel \mathbf{n}_0 + \kappa_k^\perp,$$

где $\mathbf{n}_0 = \mathbf{k}_0/k_0$ и $\mathbf{x}_k^\perp \perp \mathbf{n}_0$, имеем для энергетических знаменателей приближенное выражение

$$\mathbf{x}_k^2 - k_0^2 - i\varepsilon \approx 2k_0 \tilde{\mathbf{x}}_k^\parallel - i\varepsilon \quad (1)$$

(здесь пренебрежено слагаемыми $(\tilde{\mathbf{x}}_k^\parallel)^2$ и $(\mathbf{x}_k^\perp)^2$ по сравнению с $2k_0 \tilde{\mathbf{x}}_k^\parallel$, что приводит к относительной погрешности $\sim 1/kR$). Теперь, после подстановки в указанную формулу выражений для фурье-компонент потенциала

$$\tilde{U}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}) = \int \int \int U(\rho_k, z_k) \exp \left\{ -i \left[(\tilde{\mathbf{x}}_k^\parallel - \tilde{\mathbf{x}}_{k-1}^\parallel) z + (\mathbf{x}_k^\perp - \mathbf{x}_{k-1}^\perp) \rho_k \right] \right\} d^2 \rho_k dz_k$$

замечаем, что с помощью соотношения

$$\int \int \exp \left[i(\rho_{k+1} - \rho_k) \mathbf{x}_k^\perp \right] d^2 \mathbf{x}_k^\perp = (2\pi)^2 \delta(\rho_{k+1} - \rho_k)$$

выполняются интегрирования по \mathbf{x}_k^\perp , а появляющиеся δ -функции позволяют проинтегрировать и по ρ_k , так что во всех множителях $U(\rho_k, z_k)$ значения ρ_k (с разными k) оказываются одинаковыми. Используя, наконец, значение интеграла

$$\int \frac{\exp \left[i(z_{k+1} - z_k) \mathbf{x}_k^\parallel \right]}{2k_0 \tilde{\mathbf{x}}_k'' - i\varepsilon} d\mathbf{x}_k^\parallel = \frac{i\pi}{k_0} \eta(z_{k+1} - z_k)$$

($\eta(z)$ — ступенчатая функция, см. 13.14), находим в результате описанных преобразований ($k = k_0$):

$$f^{(n)} \approx \frac{k}{2\pi i} \left(-\frac{im}{\hbar^2 k} \right)^n \int_{-\infty}^{z_1} dz_1 \int_{-\infty}^{z_2} dz_2 \dots \dots \int_{-\infty}^{\infty} dz_n \int \int U(\rho, z_1) \dots U(\rho, z_n) e^{-iq_\perp \rho} d^2 \rho, \quad (2)$$

причем здесь в показателе экспоненты пренебрежено слагаемым $-iq_\parallel z_n$, так как $q_\parallel \ll q_\perp$ (сравнить с 13.2). В этом выражении можно по всем z_k интегрировать в бесконечных пределах, если ввести множитель $(n!)^{-1}$; после этого получаем амплитуду рассеяния

В эйкональном приближении:

$$f \approx \frac{k}{2\pi i} \iint \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{im}{\hbar^2 k} \right)^n \left[\int_{-\infty}^{\infty} U(\rho, z) dz \right]^n \right\} e^{-iq_{\perp} \rho} d^2 \rho =$$

$$= \frac{ik}{2\pi} \iint \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} U(\rho, z) dz \right] \right\} e^{-iq_{\perp} \rho} d^2 \rho. \quad (3)$$

В заключение укажем условия применимости этого выражения, следующие из приведенного выше его вывода. Пренебрежение в показателе экспоненты формулы (2) слагаемым $q_{\parallel} z \leq q^2 R/k \approx k\theta^2 R \ll 1$ предполагает, что угол рассеяния $\theta \ll 1/\sqrt{kR}$. Так как $kR \gg 1$, то эта область включает углы рассеяния $\theta \leq 1/kR$, вносящие доминирующий вклад в полное сечение. Далее, в связи с соотношением (1) отмечалось, что его использование вносит погрешность $\sim 1/kR$. Однако вычисляемая (приблизительно) величина входит в показатель экспоненты выражения (3). Поэтому условием его применимости является малость по сравнению с единицей абсолютной (а не относительной!) погрешности показателя экспоненты, что приводит к следующему ограничению:

$$\frac{1}{\hbar v} UR \cdot \frac{1}{kR} \ll 1, \quad \text{т. е. } |U(r)| \ll E$$

(известному из других соображений, см. [1, § 131]).

13.51. Приведенное в условии задачи выражение для сечения рассеяния следует из оптической теоремы, если для амплитуды рассеяния воспользоваться эйкональным приближением (XIII.17). Условием его применимости для быстрых частиц является выполнение неравенства $|U(r)| \ll E$; при этом оно справедливо для существенной области углов рассеяния $\theta \leq 1/kR$ (см. предыдущую задачу). В случае «сильного» потенциала, для которого $|U(r)| \gtrsim E$ при $r \sim R$, рассеяние под углами $\theta \sim 1/kR$ уже не описывается эйкональным выражением. Однако для рассеяния вперед, т. е. под углом $\theta = 0$, амплитуда

$$f(E, \theta = 0) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) \quad (1)$$

по-прежнему сохраняет эйкональный вид (фактически это справедливо для области малых углов рассеяния $\theta \ll 1/kR$, пока не начинают сказываться осцилляции полиномов Лежандра с $l \leq kR$ и можно положить $P_l \approx 1$ в разложении амплитуды (XIII.9) по парциальным волнам). Чтобы пояснить сделанное

утверждение, заметим, что эйкональная формула для амплитуды рассеяния получается при использовании для фазовых сдвигов квазиклассического выражения (XIII.14), см. [1, § 131]. В случае же «сильного» потенциала для них следует использовать более общее выражение (XIII.13). Однако это обстоятельство не отражается на значении амплитуды рассеяния вперед (1). Дело в том, что для таких значений l в сумме (1), для которых $|U(r_0)| \gtrsim E$ (r_0 — квазиклассическая точка поворота в выражении (XIII.13)), фазовый сдвиг обладает следующими свойствами: он велик, $|\delta_l| \gg 1$, и быстро изменяется с ростом l , так что $|\delta_{l+1} - \delta_l| \gtrsim 1$, причем эти свойства следуют как из формулы (XIII.13), так и из³³⁾ (XIII.14). Это приводит к тому, что в соответствующей части суммы (1) вклад слагаемых с $\exp(2i\delta_l)$ пренебрежимо мал из-за взаимной компенсации, связанной с быстрыми осцилляциями. Такая компенсация вкладов соседних слагаемых имеет место независимо от того, какое выражение — правильное (XIII.13) или «неправильное» (XIII.14) — используется! Для значений же l , для которых $|U(r_0)| \ll E$, по-прежнему справедливо (XIII.14). Таким образом, амплитуда рассеяния вперед быстрых частиц описывается эйкональным выражением и при нарушении условия $|U(r)| \ll E$; отсюда, согласно оптической теореме, и следует утверждение задачи. Отметим, что унитарные свойства амплитуды рассеяния в эйкональном приближении рассмотрены в 13.76.

В случае потенциального барьера (или ямы) находим

$$\begin{aligned} \sigma(E) &= 4\pi \int_0^R \left[1 - \cos \left(\xi \sqrt{1 - \frac{\rho^2}{R^2}} \right) \right] \rho d\rho = \\ &= 2\pi R^2 \left[1 - \frac{2}{\xi^2} (\xi \sin \xi + \cos \xi - 1) \right], \quad \xi = \frac{2mU_0R}{\hbar^2 k} \quad (2) \end{aligned}$$

(интеграл вычисляется подстановкой $x = \sqrt{1 - \rho^2/R^2}$). При значениях $\xi \ll 1$ из выражения (2) следует результат борновского приближения

$$\sigma(E) \approx \pi R^2 \left(\frac{mU_0^2 R^2}{\hbar^2 E} \right) \ll \pi R^2$$

для быстрых частиц (см. 13.1), а при $\xi \gg 1$ имеем $\sigma \approx 2\pi R^2$ — известный результат для сечения рассеяния быстрых частиц непроницаемой сферой (см. 13.57).

³³⁾ Так, согласно (XIII.14) имеем

$$|\delta_{l+1} - \delta_l| \sim \left| \frac{\partial}{\partial l} \delta_l \right| \sim \frac{m}{\hbar^2 k} |U(r_0)| \frac{l}{k^2 R} \sim \frac{m |U(r_0)|}{\hbar^2 k^2}.$$

13.52. Воспользуемся квазиклассической формулой для сечения рассеяния из предыдущей задачи. Учитывая значение интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz = 2\alpha\rho^{-\nu+1} \int_0^{\infty} \frac{du}{(1+u^2)^{\nu/2}} = \frac{\sqrt{\pi}\alpha}{\rho^{\nu-1}} \frac{\Gamma((\nu-1)/2)}{\Gamma(\nu/2)}$$

(подстановкой $1+u^2 = 1/t$ интеграл приводится к эйлерову интегралу — бета-функции $B(x, y)$ с $x = 1/2$ и $y = (\nu-1)/2$), можно выполнить интегрирование³⁴⁾ по переменной ρ и получить

$$\sigma(E) = 2\pi\Gamma(\lambda) \sin \frac{\pi\lambda}{2} \left[\frac{\sqrt{\pi}\alpha}{\hbar\nu} \frac{\Gamma((\nu-1)/2)}{\Gamma(\nu/2)} \right]^\mu \propto E^{-1/(\nu-1)}, \quad (1)$$

где $\lambda = (\nu-3)/(\nu-1)$ и $\mu = 2/(\nu-1)$.

Как видно из формулы (1), убывание сечения рассеяния при $E \rightarrow \infty$ является более медленным, чем в условиях применимости борновского приближения, когда $\sigma \propto 1/E$. Это связано с тем, что при рассеянии быстрых частиц в потенциале $U \propto r^{-\nu}$ с $\nu > 2$ доминирующую роль играют малые расстояния (малые прицельные параметры), на которых потенциал нельзя рассматривать как возмущение. Соответственно формула (1) при значениях энергии $E \rightarrow \infty$ справедлива для достаточно произвольного потенциала, имеющего рассматриваемый вид лишь на малых расстояниях. Заметим, что для значений $\nu \rightarrow 2$ энергетическая зависимость сечения, определяемая формулой (1), «сшивается» с результатом, полученным в борновском приближении.

13.53. Для вычисления сечения рассеяния воспользуемся результатом 13.51. Квазиклассический фазовый сдвиг при значениях прицельного параметра $\rho \gg R$ равен

$$\delta(\rho) = \frac{g(E)}{2\hbar\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{R} \sqrt{\rho^2 + z^2}\right) dz \approx \frac{g_0}{2\hbar\nu} \sqrt{2\pi\rho R} \left(\frac{E}{E_0}\right)^n e^{-\rho/R} \quad (1)$$

³⁴⁾ Сначала делаем подстановку $x = \rho^2 + z^2$ и выполняем интегрирование по частям, что приводит к интегралу вида $\int \frac{1}{x^s} \sin\left(\frac{a}{x^s}\right) dx$ с $s = (\nu-1)/2$. Выразив теперь синус через экспоненты и сделав подстановки $v = \pm ia/x^s$, приходим к интегралам, определяющим гамма-функцию.

(для вычисления интеграла следует воспользоваться разложением $\sqrt{\rho^2 + z^2} \approx \rho + z^2/2\rho$).

Обозначим через ρ_0 значение ρ , для которого $\delta(\rho_0) = 1$. В случае $n > 1/2$ и больших энергий имеем $\rho_0 \gg R$ (при $E \rightarrow \infty$ также и $\rho_0 \rightarrow \infty$). Теперь заметим, что фазовый сдвиг является резкой, быстро убывающей функцией ρ . Поэтому при вычислении сечения по формуле из 13.51 вкладом области интегрирования $\rho > \rho_0$ можно пренебречь вообще (так как в ней $\delta \approx 0$), а в области значений $\rho < \rho_0$ можно пренебречь вкладом, отвечающим быстро осциллирующему слагаемому $\cos 2\delta(\rho)$ (ввиду $\delta \gg 1$) и получить в результате $\sigma(E) \approx 2\pi\rho_0^2(E)$. Отсюда, используя выражение (1), находим

$$\sigma(E) \approx \sigma_0 \ln^2 \left(\frac{E}{E_0} \right), \quad \text{где} \quad \sigma_0 = 2\pi \left(n - \frac{1}{2} \right)^2 R^2, \quad (2)$$

в случае $n > 1/2$ (при приближенном вычислении $\rho_0(E)$ из соотношения $\ln \delta(\rho_0) = 0$ пренебрежено слагаемым $\ln(\rho_0/R)$ по сравнению с ρ_0/R ; заметим, что при значениях $n < 1/2$ сечение рассеяния с ростом E убывает).

13.54. Согласно (XIII. 19) имеем для значений $\rho \ll R$

$$\delta(\rho) = -\frac{\alpha}{2\hbar v} \int_{-R}^R \frac{dz}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \approx -\frac{\alpha}{\hbar v} \ln \frac{2R}{\rho} \quad (1)$$

и для амплитуды рассеяния (XIII. 19) при $q \neq 0$ получаем выражение

$$f(E, q) = \frac{k}{2\pi i} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{iS(\rho, \varphi)} \rho \, d\rho \, d\varphi,$$

где

$$S = \frac{2\alpha}{\hbar v} \ln \frac{\rho}{2R} - q\rho \cos \varphi. \quad (2)$$

В случае $|\alpha| \gg \hbar v$ фаза экспоненты велика и быстро изменяется с изменением ρ и φ . В такой ситуации значение интеграла определяется в основном вкладом областей интегрирования в окрестностях экстремальных точек фазы как функции переменных ρ , φ . Из условий экстремума находим

$$2\alpha = \hbar v \rho_0 q \cos \varphi_0, \quad q\rho_0 \sin \varphi_0 = 0;$$

отсюда $\rho_0 = 2|\alpha|/\hbar v q$ и $\varphi_0 = 0$ в случае $\alpha > 0$ или $\varphi = \pi$ для $\alpha < 0$ (при этом $|\alpha|/\rho_0 \ll \hbar k v$, т. е. $|U| \ll E$, что оправдывает использование приближения эйконала). Разлагая $S(\rho, \varphi)$ в окрестности экстремальной точки ρ_0, φ_0 с «квадратичной» точ-

ностью и используя значение интеграла Пуассона, получаем амплитуду рассеяния

$$f(E, q) \approx -i \frac{2m|\alpha|}{\hbar^2 q^2} \exp(iS(\rho_0, \varphi_0)). \quad (3)$$

При этом дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q^2} \right)^2 \approx \frac{\alpha^2}{E^2 \theta^4},$$

что, как и в условиях применимости борновского приближения, совпадает с формулой Резерфорда (для углов рассеяния $\theta \ll 1$).

Заметим в заключение, что необходимость «обрезания» потенциала и отсутствие предела при $R \rightarrow \infty$ для амплитуды рассеяния (но не для дифференциального сечения) связано с медленным убыванием кулоновского потенциала, так что на больших расстояниях волновая функция не переходит в в.ф. свободной частицы. Возникающее при этом искажение, равное

$$\Delta(r) = -\frac{\alpha}{\hbar v} \ln 2kr,$$

фазы радиальной функции, см. [1, § 36], при обрезании потенциала на расстоянии $r = R$ переносится в амплитуду рассеяния в виде множителя $\exp(2i\Delta(R))$. Соответственно, исключая его из выражения (3), получаем амплитуду рассеяния

$$\begin{aligned} \tilde{f}(k, q) &= f e^{-2i\Delta(R)} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q^2} e^{i\varphi(k, q)}, \\ \varphi(k, q) &= -\frac{2\alpha}{\hbar v} \ln \frac{q}{2k} + \frac{2\alpha}{\hbar v} \ln \frac{|\alpha|}{\hbar v} - \frac{2\alpha}{\hbar v} + \frac{\pi}{2} \frac{\alpha}{|\alpha|}, \end{aligned} \quad (4)$$

уже не зависящую от радиуса обрезания и совпадающую, как и следовало ожидать, с амплитудой кулоновского рассеяния³⁵⁾

$$f_{\text{кул}} = -\frac{\alpha}{2mv^2 \sin^2(\theta/2)} \frac{\Gamma(1 + i\alpha/\hbar v)}{\Gamma(1 - i\alpha/\hbar v)} \exp\left(-\frac{2i\alpha}{\hbar v} \ln \sin \frac{\theta}{2}\right),$$

см. [1, § 135], в квазиклассическом случае $|\alpha|/\hbar v \gg 1$ (причем для всех углов рассеяния, хотя формально эйкональное приближение применимо для углов $\theta \ll \hbar v/|\alpha|$).

13.55. В приближении эйконала амплитуда рассеяния описывается выражением

$$\begin{aligned} f(k, q_{\perp}) &= \\ &= \frac{ik}{2\pi} \iint \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} U(\rho, z) dz\right] \right\} e^{-iq_{\perp} \rho} d^2 \rho. \end{aligned} \quad (1)$$

³⁵⁾ Здесь отношение гамма-функций определяется лишь их фазами, которые легко найти, если воспользоваться известными асимптотиками для $\ln \Gamma(z)$.

Отсюда с помощью преобразования Фурье получаем

$$\exp \left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} U(\rho, z) dz \right] = 1 + \frac{i}{2\pi k} \int \int f(k, \kappa_{\perp}) e^{i\kappa_{\perp} \rho} d^2 \kappa_{\perp}. \quad (2)$$

Подставляя теперь в формулу (1) потенциал

$$U(\mathbf{r}) = U_1(\mathbf{r} - \mathbf{a}/2) + U_2(\mathbf{r} + \mathbf{a}/2)$$

и переходя в получающемся выражении к одноцентровым амплитудам рассеяния $f_{1,2}$ на потенциалах $U_{1,2}(\mathbf{r})$ согласно соотношению (2), получаем амплитуду рассеяния на двух центрах в эйкональном приближении

$$\begin{aligned} f(k, \mathbf{q}_{\perp}) = & f_1(k, \mathbf{q}_{\perp}) \exp \left(-\frac{i}{2} \mathbf{q}_{\perp} \mathbf{a}_{\perp} \right) + \\ & + f_2(k, \mathbf{q}_{\perp}) \exp \left(\frac{i}{2} \mathbf{q}_{\perp} \mathbf{a}_{\perp} \right) + \\ & + \frac{i}{2\pi k} \int f_1 \left(k, \kappa_{\perp} + \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2} \right) f_2 \left(k, -\kappa_{\perp} + \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2} \right) \exp(-i\kappa_{\perp} \mathbf{a}_{\perp}) d^2 \kappa_{\perp}; \end{aligned} \quad (3)$$

здесь \mathbf{a}_{\perp} , κ_{\perp} — составляющие векторов, перпендикулярные направлению импульса падающих частиц \mathbf{n}_0 ; так, $\mathbf{a} = a_{\parallel} \mathbf{n}_0 + \mathbf{a}_{\perp}$.

Для приложения формулы (3) к вычислению амплитуды упругого рассеяния частицы на связанной системе из двух центров (т. е. на некоторой составной частице), ее следует усреднить с волновой функцией $\Psi_0(\mathbf{a})$ составной системы, т. е. выполнить интегрирование $\int d^3 a |\Psi_0(\mathbf{a})|^2 \dots$ (при этом предполагается, что скорости частиц «мишени» малы по сравнению со скоростью налетающей частицы). Подчеркнем также, что $\Psi_0(\mathbf{a})$ является в. ф. составной системы в ее с. ц. и. (причем мишень как целое считается неподвижной). Далее, поскольку радиусы-векторы частиц мишени были выбраны равными $\pm \mathbf{a}/2$, то имеется в виду, что у них одинаковые массы (подобная дейтрону составная система). Возникающие при отмеченном усреднении интегралы выражаются через формфактор составной системы, равный

$$F(\mathbf{q}) = \int |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 \exp \left(-\frac{i}{2} \mathbf{q} \mathbf{r} \right) d^3 r.$$

В результате усреднения выражение (3) принимает вид

$$\begin{aligned} \langle f(k, \mathbf{q}_{\perp}) \rangle = & f_1(k, \mathbf{q}_{\perp}) F(\mathbf{q}_{\perp}) + f_2(k, \mathbf{q}_{\perp}) F(-\mathbf{q}_{\perp}) + \\ & + \frac{i}{2\pi k} \int f_1 \left(k, \kappa_{\perp} + \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2} \right) f_2 \left(k, -\kappa_{\perp} + \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2} \right) F(2\kappa_{\perp}) d^2 \kappa_{\perp}. \end{aligned} \quad (4)$$

Полное сечение рассеяния на составной системе с помощью оптической теоремы (XIII.11) может быть выражено через амплитуду упругого рассеяния на угол $\theta = 0$ (при этом $\mathbf{q}_\perp = 0$), так что

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_1 + \sigma_2 + \frac{2}{k^2} \operatorname{Re} \int F(2\mathbf{x}_\perp) f_1(k, \mathbf{x}_\perp) f_2(k, -\mathbf{x}_\perp) d^2\mathbf{x}_\perp; \quad (5)$$

здесь $\sigma_{1,2}$ — сечения рассеяния на свободных частицах мишени (подчеркнем, что полное сечение рассеяния включает и процессы с «развалом» исходной составной системы).

Теперь заметим, что специфика рассеяния на слабосвязанной системе определяется тем обстоятельством, что убывание ее формфактора происходит при значениях импульса

$$q \sim 1/R \sim (\mu \epsilon_{\text{св}} / \hbar^2)^{1/2}, \quad (6)$$

где R — размер системы, $\epsilon_{\text{св}}$ и μ — энергия связи и приведенная масса частиц мишени, причем R существенно превосходит радиус взаимодействия. Так как характерные значения q при рассеянии порядка обратного радиуса взаимодействия, т. е. велики по сравнению с (6), то в выражении (5) амплитуды $f_{1,2}$ можно вынести из-под интеграла в точке $\mathbf{x}_\perp = 0$ и после этого выполнить следующее преобразование:

$$\begin{aligned} \int F(2\mathbf{x}_\perp) d^2\mathbf{x}_\perp &= \int \int \int \exp(-i\mathbf{x}_\perp \rho) |\Psi_0(\rho, z)|^2 d^2\rho dz d^2\mathbf{x}_\perp = \\ &= (2\pi)^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_0(0, z)|^2 dz = 2\pi \int_0^{\infty} \frac{1}{r^2} |\Psi_0(r)|^2 4\pi r^2 dr \equiv 2\pi \left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle. \end{aligned}$$

Здесь предположено, что орбитальный момент составной системы равен нулю, и поэтому в.ф. $\Psi_0(r)$ является сферически-симметричной; $\langle R^{-2} \rangle$ — среднее значение обратного квадрата расстояния между частицами мишени. Таким образом, получаем

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_1 + \sigma_2 + \Delta, \quad \Delta = \frac{4\pi}{k^2} \left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle \operatorname{Re} f_1(k, 0) f_2(k, 0). \quad (7)$$

В частности, если $f_{1,2}(k, 0)$ — чисто мнимые величины, то, используя оптическую теорему для одноцентровых амплитуд, находим

$$\Delta = -\frac{1}{4\pi} \sigma_1 \sigma_2 \left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle. \quad (8)$$

Заметим, что такой случай мнимых амплитуд можно рассматривать (моделировать) как рассеяние на непроницаемых (или «черных») сферах, сравнить с 13.57 и 13.90. При этом несколько

меньшее (так как $\Delta < 0$), чем суммарное $\sigma_1 + \sigma_2$ сечение рассеяния на двух центрах наглядно можно объяснить как результат взаимного «затенения» сфер. Читателю предлагается убедиться в том (ограничиваясь, для простоты, случаем одинаковых рассеивающих центров), что при $R \gg a$ расчет эффекта «затенения» в рамках классической механики воспроизводит результат (8) данной задачи при условии, что радиусы сфер a выбраны такими, что одноцентровые сечения $\sigma_1 = \sigma_2 = \pi a^2$.

13.56. Имея в виду вывод выражения для амплитуды рассеяния в эйкональном приближении для «обычного» потенциала, основанный на использовании квазиклассического выражения (XIII. 14) для фазового сдвига и замене суммирования по парциальным волнам интегрированием по прицельному параметру, см. [1, § 131], и замечая, что в приближении (XIII. 14) для обменного потенциала фазовый сдвиг

$$\delta_{l, \text{обм}} = (-1)^l \delta_{l, \text{обыч}}, \quad (1)$$

легко прийти к следующим результатам.

В области малых углов рассеяния, $\theta \ll 1$, в случае обменного потенциала амплитуда рассеяния описывается аналогичной (XIII. 18) формулой с $\cos 2\delta_l$ вместо $e^{2i\delta_l}$, т. е.

$$f_{\text{обм}}(k, \theta) \underset{\theta \ll 1}{\approx} \frac{k}{2\pi i} \iint [\cos 2\delta(\rho) - 1] \exp(-i\rho\theta) d^2\rho =$$

$$= -ik \int_0^\infty [\cos 2\delta(\rho) - 1] J_0(k\rho\theta) \rho d\rho, \quad (2)$$

где $\delta(\rho)$ определяется прежним выражением. Это связано с тем, что появление множителя $(-1)^l$ в формуле (1) не изменяет значения части амплитуды рассеяния, связанной с четными, как функциями δ_l , слагаемыми. Для нечетных слагаемых, $\propto \sin 2\delta_{l, \text{обм}}$, происходит сильная взаимная компенсация вкладов соседних членов суммы по l , и эта часть амплитуды пренебрежимо мала.

Заметим, что амплитуда (2) — чисто мнимая и совпадает с мнимой частью амплитуды рассеяния на обычном потенциале $U(r)$. С учетом оптической теоремы совпадают и полные сечения рассеяния (одинаковы и парциальные сечения рассеяния σ_l).

В случае обменного потенциала амплитуда рассеяния имеет резкий максимум в области углов, близких к π (при рассеянии назад, сравнить с 13.3). Учитывая соотношение для полиномов

Лежандра $P_l(z) = (-1)^l P_l(-z)$, находим

$$f_{\text{обм}}(k, \theta) \underset{\pi - \theta \ll 1}{\approx} \frac{k}{2\pi} \int \int \sin 2\delta(\rho) \exp(-i \Delta \rho) d^2\rho = \\ = k \int_0^\infty \sin 2\delta(\rho) J_0(k\rho(\pi - \theta)) \rho d\rho, \quad (3)$$

где $\Delta = k + k_0$. В этой области углов амплитуда — вещественная функция и совпадает с вещественной частью амплитуды рассеяния на обычном потенциале под углом $\theta' = \pi - \theta \ll 1$. Из полученных выражений (2) и (3) для амплитуды равенство полных сечений рассеяния на обменном и обычном потенциалах очевидно и без привлечения оптической теоремы.

13.57. Для вычисления амплитуды рассеяния быстрых частиц воспользуемся разложением ее по парциальным волнам (XIII.9) и квазиклассическим выражением (XIII.13) для фазовых сдвигов. Так как $U = 0$ при $r > R$, то интегрирование по частям в (XIII.13) дает

$$\delta_l = \left(l + \frac{1}{2}\right) \arccos \frac{l + 1/2}{kR} - \sqrt{k^2 R^2 - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}, \quad l \leq L, \quad (1)$$

где $L = kR - 1/2$ (при этом $r_0 = R$), а для значений $l > L$ получаем (при этом $r_0 = (l + 1/2)/k$)

$$\delta_l = 0, \quad l > L. \quad (2)$$

При $l > L$ точные фазовые сдвиги экспоненциально малы; поэтому квазиклассика, не обеспечивающая такой точности, дает $\delta_l = 0$. Заметим также, что, строго говоря, в формулу (1) следовало бы ввести дополнительное слагаемое, равное $-\pi/4$, имеющее такое же происхождение, как и рассмотренная в 9.2 модификация правила квантования (для $l < L$ в данной задаче квазиклассика применима, вообще говоря, непосредственно вплоть до точки поворота $r = R$). Укажем, наконец, что полученные результаты для δ_l требуют уточнения при значениях l , близких к L , так как в этом случае в окрестности точки $r = R$ квазиклассика неприменима и условия сшивания решений требуют дополнительного исследования (отмеченные обстоятельства несущественны для дальнейших вычислений).

Воспользовавшись соотношениями (1) и (2), амплитуду рассеяния удобно записать в виде

$$f = f_{\text{дифр}} + f_{\text{кл}}, \quad (3)$$

$$f_{\text{дифр}} = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\cos \theta),$$

$$f_{\text{кл}} = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^L (2l+1) e^{2i\delta_l} P_l(\cos \theta).$$

Поясним, имея в виду дальнейшее исследование в данной и в следующей за ней задачах, смысл используемого разбиения амплитуды на «дифракционную» и «классическую» части. В области малых углов рассеяния (фактически при значениях $\theta \ll \ll (kR)^{-1/3} \ll 1$) имеем $|f_{\text{дифр}}| \gg |f_{\text{кл}}|$, при этом вклад в полное сечение этой области составляет πR^2 . Рассеяние под малыми углами в условиях, подобных данной задаче, называют *дифракционным*, так как по своей физической природе оно аналогично дифракции плоскопараллельного пучка света, падающего на непрозрачный (отражающий или поглощающий) экран — *дифракции Фраунгофера* [27], см. также 13.90. При углах рассеяния $\theta \gg (kR)^{-1/3}$ уже пренебрежимо мала часть амплитуды $f_{\text{дифр}}$. При этом $f_{\text{кл}}$ описывает изотропное распределение рассеянных частиц: $d\sigma/d\Omega \approx |f_{\text{кл}}|^2 \approx R^2/4$, так что сечение рассеяния под такими углами также составляет πR^2 (как и в классической механике). Полное сечение рассеяния равно $2\pi R^2$. Наконец, в области углов $\theta \sim (kR)^{-1/3}$ амплитуды $f_{\text{дифр}}$ и $f_{\text{кл}}$ одного порядка; вклад в сечение от рассеяния под такими углами пренебрежимо мал по сравнению с πR^2 .

Для достаточно малых углов рассеяния (пока не начинают сказываться осцилляции полиномов Лежандра как функций l : при $\theta = 0$ они вообще отсутствуют, так как $P_l(1) = 1$) дифракционная часть амплитуды рассеяния оказывается доминирующей и $f \approx f_{\text{дифр}}$. Действительно, так как фазовые сдвиги (1) велики, $|\delta_l| \gg 1$, и быстро изменяются, то в сумме для $f_{\text{кл}}$ происходит взаимная компенсация, из-за осцилляций $e^{2i\delta_l}$, вкладов различных слагаемых. Воспользовавшись соотношением $P_l(\cos \theta) \approx \approx J_0((l+1/2)\theta)$ при $l \gg 1$, $\theta \ll 1$ и заменяя суммирование в $f_{\text{дифр}}$ интегрированием по l , получаем ($L \approx kR$):

$$f_{\text{дифр}} \approx \frac{i}{2k} \int_0^L (2l+1) J_0\left(\left(l + \frac{1}{2}\right)\theta\right) dl \approx iR \frac{J_1(kR\theta)}{\theta} \quad (4)$$

(здесь использована формула $\int x J_0(x) dx = x J_1(x)$).

Амплитуда дифракционного рассеяния — чисто мнимая. Воспользовавшись оптической теоремой и соотношением $J_1(x) \approx \approx x/2$ при $x \rightarrow 0$, находим полное сечение рассеяния $\sigma = 2\pi R^2$, что в два раза превышает классическое сечение (сравнить с 13.51).

В области малых углов рассеяния дифференциальное сечение $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\text{дифр}}|^2$ является осциллирующей функцией θ , причем расстояние между соседними максимумами имеет порядок величины $\Delta\theta \sim 1/kR$. Воспользовавшись известными асимптотиками функций Бесселя, согласно (4) находим

$$\frac{d\sigma_{\text{дифр}}}{d\Omega} \Big|_{\theta \ll 1/kR} \approx \frac{1}{4} (kR)^2 R^2;$$

$$\frac{d\sigma_{\text{дифр}}}{d\Omega} \Big|_{1/kR \ll \theta \ll 1} \approx \frac{2R \sin^2(kR\theta - \pi/4)}{\pi k\theta^3}.$$

Наибольшую величину дифференциальное сечение рассеяния имеет в области углов $\theta \leq 1/kR$ и быстро спадает с ростом θ . Полное сечение дифракционного рассеяния

$$\sigma_{\text{дифр}} = \int |f_{\text{дифр}}|^2 d\Omega \approx 2\pi R^2 \int_0^{\infty} \frac{J_1^2(kR\theta)}{\theta} d\theta = \pi R^2,$$

т. е. составляет половину полного сечения рассеяния (ввиду быстрого убывания подынтегральной функции интегрирование распространено до бесконечности и использовано значение интеграла

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{x} J_1^2(x) dx = \frac{1}{2}.$$

13.58. Рассмотрим часть $f_{\text{кл}}$ амплитуды рассеяния

$$f_{\text{кл}} = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^L (2l+1) e^{2i\delta_l} {}_1P_l(\cos\theta), \quad L = kR, \quad (1)$$

где δ_l даются формулой (1) предыдущей задачи.

Общий подход к вычислению сумм вида (1) в квазиклассическом случае изложен в [1, § 127]. Не повторяя вывода основных формул, укажем лишь результаты их применения к рассматриваемому случаю. Формула (127.3) из [1] принимает вид

$$2 \arccos \frac{l + 1/2}{kR} \pm \theta = 0.$$

Отсюда следует, что экстремум имеется лишь у показателя первой экспоненты в (127.2), причем для экстремальной точки l_0 имеем

$$l_0 + \frac{1}{2} = kR \cos \frac{\theta}{2}, \quad \delta_{l_0} = \frac{1}{2} \left(l_0 + \frac{1}{2} \right) \theta - kR \sin \frac{\theta}{2}.$$

Окончательное выражение для $f_{\text{кл}}$ определяется непосредственно формулой ³⁶⁾ (127.6), принимающей вид

$$f_{\text{кл}} = -\frac{i}{2} R \exp \left[-2ikR \sin \frac{\theta}{2} \right]. \quad (2)$$

Отсюда имеем

$$\frac{d\sigma_{\text{кл}}}{d\Omega} = |f_{\text{кл}}|^2 = \frac{R^2}{4}, \quad \sigma_{\text{кл}} = \pi R^2, \quad (3)$$

что совпадает с результатами классической механики.

В заключение приведем рис. 50, иллюстрирующий качественную зависимость дифференциального сечения рассеяния $d\sigma/d\Omega$ от

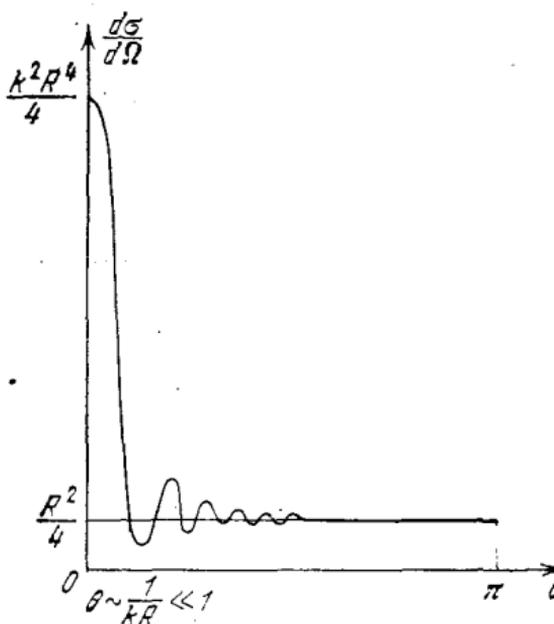


Рис. 50

угла θ при рассеянии быстрых частиц, $kR \gg 1$ (более точно, при $(kR)^{1/3} \gg 1$), на непроницаемой сфере согласно результатам данной и предыдущей задач.

13.59. Формулы (XIII.1—XIII.5) очевидным образом обобщаются на случай рассеяния частицы с отличным от нуля спи-

³⁶⁾ Она относится фактически к отталкивательному потенциалу; в ней пропущен фазовый множитель $e^{-i\pi/4}$, возникающий при переходе от суммирования по l к интегрированию по ξ (что, конечно, не отражается на величине дифференциального сечения рассеяния).

ном. Подстановка оператора взаимодействия \hat{U} (вместо потенциала U) и невозмущенной волновой функции $\Psi_{\mathbf{k}_0}^+ = e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}\chi_i$, где χ_i — спиновая функция частицы до столкновения, в (XIII.5) определяет спинорную амплитуду рассеянной волны $F = \hat{f}\chi_i$ в борновском приближении. Отсюда

$$\hat{f}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} [U_0(r) + U_1(r) \hat{1}\hat{\sigma}] e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}} dV = \\ = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left\{ \tilde{U}_0(q) - i[\mathbf{k}_0\mathbf{k}] \hat{\sigma} \cdot \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial q} \tilde{U}_1(q) \right\}, \quad (1)$$

где $\tilde{U}_{0,1}(q) = \int U_{0,1}(r) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) dV$.

Согласно (1) и (XIII.23) полное сечение рассеяния в борновском приближении описывается выражением (сравнить с 13.1)

$$\sigma = \frac{m^2}{4\pi\hbar^4 k^2} \int_0^{4k^2} \left\{ |U_0(q)|^2 + \left(k^2 - \frac{q^2}{4}\right) \left| \frac{\partial \tilde{U}_1(q)}{\partial q} \right|^2 \right\} dq^2 \quad (2)$$

(подчеркнем, что в общем случае слагаемое в дифференциальном сечении $\propto \mathbf{v}\mathbf{P}_0$, описывающее азимутальную асимметрию в рассеянии, см. (XIII.23), при вычислении полного сечения рассеяния исчезает: сечение, просуммированное по проекциям спина рассеянных частиц, от вектора поляризации \mathbf{P}_0 в начальном состоянии не зависит). Отсюда для быстрых частиц получаем³⁷⁾

$$\sigma(E) \approx C_0/E + C_1, \quad (3)$$

где

$$C_0 = \frac{m}{8\pi\hbar^2} \int_0^\infty |\tilde{U}_0(q)|^2 dq^2, \quad C_1 = \frac{m^2}{4\pi\hbar^4} \int_0^\infty \left| \frac{\partial \tilde{U}_1(q)}{\partial q} \right|^2 dq^2.$$

Оставленные здесь слагаемые отвечают различным взаимодействиям, и при большой, но конечной энергии они могут быть одного порядка. Фактически из релятивистского характера спин-орбитального взаимодействия для электрона следует, что именно

³⁷⁾ Читателю предлагается самостоятельно обсудить вопрос о применимости борновского приближения для спин-орбитального взаимодействия и вопрос об ограничении на закон убывания $U_1(r)$ на больших расстояниях, обеспечивающем конечность полного сечения рассеяния. Подчеркнем лишь, что независимость от энергии при $E \rightarrow \infty$ сечения рассеяния при таком взаимодействии отражает его эффективный рост с увеличением E , так как $I_{\text{эф}} \sim kR \propto \sqrt{E}$.

второе, не убывающее с ростом энергии слагаемое в нерелятивистском случае оказывается менее существенным.

Для рассеяния электрона в кулоновском поле получаем

$$\hat{f} = \frac{2mZe^2}{\hbar^2 q^2} \left\{ 1 - i \frac{\hbar^2 k^2}{4m^2 c^2} \sin \theta \cdot (\mathbf{v}\hat{\sigma}) \right\}, \quad (4)$$

где $\mathbf{v} = [\mathbf{k}_0 \mathbf{k}] / |[\mathbf{k}_0 \mathbf{k}]|$; зависящая от спина часть амплитуды рассеяния имеет малость $\sim \theta v^2/c^2$.

Сделаем замечание о вычислении зависящей от спина части амплитуды рассеяния в случае спин-орбитального взаимодействия с $U_1(r) = \frac{\gamma}{r} \frac{\partial}{\partial r} U_0(r)$. Имея в виду для нее выражение (1), выполним следующие преобразования:

$$\begin{aligned} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} U_1 \hat{\Gamma} e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} dV &= \int U_1 [\mathbf{r} \mathbf{k}_0] e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV = \\ &= -\gamma \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} [\mathbf{k}_0 \nabla U_0(r)] dV = -i\gamma [\mathbf{k}_0 \mathbf{q}] \tilde{U}_0(q) \end{aligned}$$

Поэтому для рассматриваемого спин-орбитального взаимодействия амплитуда рассеяния в борновском приближении описывается выражением

$$\hat{f} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}_0(q) (1 - i\gamma [\mathbf{k}_0 \mathbf{k}] \hat{\sigma}). \quad (5)$$

Отсюда, воспользовавшись выражением $\tilde{U}_0 = -4\pi Ze^2/q^2$ для фурье-компоненты кулоновского потенциала и значением параметра $\gamma = \hbar^2/4m^2 c^2$, приходим к (4).

13.60. В исходной системе координат имеется только электрическое поле $\mathcal{E} = -\nabla\phi$ с $\phi = Ze/r$. Чтобы получить выражение, описывающее взаимодействие с ним нейтрона, движущегося со скоростью $\mathbf{v} = \mathbf{p}/M$, перейдем в систему координат, связанную с нейтроном. В этой системе появляется магнитное поле $\mathcal{H} \approx [\mathcal{E}\mathbf{v}]/c$, см. [27], и энергия взаимодействия оказывается равной (μ — магнитный момент нейтрона)

$$U = -\mu\mathcal{H} = \frac{1}{Mc r} \frac{\partial\phi}{\partial r} \mu\mathbf{L}, \quad \mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]. \quad (1)$$

Квантовомеханическое обобщение этой формулы, получающееся путем замен: μ на оператор спинового магнитного момента³⁸⁾ $\hat{\mu} = \mu_0 \hat{\sigma}$, где $\mu_0 = \beta\hbar/2Mc$ (для нейтрона экспериментальное значение $\beta = -1,91$), и \mathbf{L} на $\hbar\hat{\mathbf{l}}$, определяет оператор взаимодействия

$$\hat{U} = \frac{\gamma}{r} \frac{\partial\phi}{\partial r} \hat{\sigma}\hat{\mathbf{l}}, \quad \gamma = \frac{\beta\hbar^2 e}{2M^2 c^2}. \quad (2)$$

³⁸⁾ См. сноску к условию задачи 13.59.

Используя выражения для амплитуды рассеяния при спин-орбитальном взаимодействии в борновском приближении, полученные в предыдущей задаче, находим

$$\hat{f} = i \frac{2Ze^2 M \gamma}{\hbar^2 q^2} \hat{\sigma} [\mathbf{k}_0 \mathbf{q}] = i \frac{\beta Ze^2}{2Mc^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} (\hat{\sigma} \mathbf{v}) \quad (3)$$

($\mathbf{v} = [\mathbf{k}_0 \mathbf{k}] / |\mathbf{k}_0 \mathbf{k}|$ — орт нормали к плоскости рассеяния). Дифференциальное сечение рассеяния, просуммированное по спиновым состояниям рассеянного нейтрона,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = F^* F = \chi_i^* \hat{f} + \hat{f} \chi_i = \left(\frac{\beta Ze^2}{2Mc^2} \right)^2 \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta}{2}; \quad (4)$$

здесь $F = \hat{f} \chi_i$ — спинорная амплитуда рассеянной волны. Для рассеяния под малыми углами, $\theta \rightarrow 0$, имеем $d\sigma/d\Omega \propto \theta^{-2}$, так что полное сечение рассеяния оказывается бесконечным (расходимость сечения устраняется при учете экранировки заряда ядра).

13.61. Эрмитовость оператора взаимодействия $\hat{U} = U_0(r) + U_1(r) \hat{\sigma} \hat{\Gamma}$ предполагает вещественность функций $U_{0,1}(r)$. При этом вещественны и их фурье-компоненты $\tilde{U}_{0,1}(q)$, а соответственно и инвариантные функции A и B в выражении для амплитуды рассеяния

$$\hat{f} = A(k, \theta) + iB(k, \theta) \mathbf{v} \hat{\sigma} \quad (1)$$

в борновском приближении, см. формулы (1) и (5) из 13.59. Отсюда согласно общей формуле (XIII.24) для поляризации рассеянных частиц следует, что вектор поляризации $\mathbf{P} = 0$, если первоначально частицы были неполяризованы, $\mathbf{P}_0 = 0$.

При рассеянии поляризованных частиц вектор поляризации рассеянных частиц равен³⁹⁾, см. [1, § 140]:

$$\mathbf{P} = \frac{(|A|^2 - |B|^2) \mathbf{P}_0 + 2|B|^2 \mathbf{v} (\mathbf{v} \mathbf{P}_0) - 2 \operatorname{Re} AB^* [\mathbf{v} \mathbf{P}_0] + 2 \operatorname{Im} AB^* \mathbf{v}}{|A|^2 + |B|^2 + 2 \operatorname{Im} AB^* \mathbf{v} \mathbf{P}_0}.$$

Так как в борновском приближении A и B — вещественные функции, то

$$\mathbf{P}_B = \frac{1}{A^2 + B^2} \{ (A^2 - B^2) \mathbf{P}_0 + 2B^2 \mathbf{v} (\mathbf{v} \mathbf{P}_0) - 2AB [\mathbf{v} \mathbf{P}_0] \},$$

и, как легко убедиться, $\mathbf{P}_B^2 = \mathbf{P}_0^2$. Поворот вектора поляризации происходит вокруг нормали к плоскости рассеяния, при этом $\mathbf{v} \mathbf{P}_B = \mathbf{v} \mathbf{P}_0$.

³⁹⁾ Напомним, что по сравнению с [1, § 140] в выражении (1) перед инвариантной функцией B введен множитель i .

13.62. В первом порядке теории по взаимодействию

$$\hat{U} = U_0(r) + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2r} \frac{\partial U_0(r)}{\partial r} \hat{\sigma} \hat{1}, \quad \text{где} \quad U_0(r) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-r/R},$$

амплитуда рассеяния имеет вид

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = \frac{2mZe^2}{\hbar^2 [(k - k_0)^2 + R^{-2}]} \left\{ 1 - i \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [\mathbf{k}_0 \mathbf{k}] \hat{\sigma} \right\} \equiv \\ \equiv A^{(1)} + iB^{(1)} \mathbf{v} \hat{\sigma} \quad (1)$$

(см. формулы (4) и (5) из 13.59). Функции $A^{(1)}$ и $B^{(1)}$ — вещественные, и поэтому в первом порядке теории возмущений поляризация при рассеянии не возникает, см. формулу (XIII.24).

Общее выражение для амплитуды второго приближения получается, как и в случае рассеяния бесспиновых частиц (см. 13.10):

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = \frac{1}{2\pi^2} \int \hat{f}^{(1)}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}) \hat{f}^{(1)}(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{k}_0) \frac{d^3\boldsymbol{\kappa}}{\boldsymbol{\kappa}^2 - k^2 - i\epsilon}. \quad (2)$$

При вычислении $A^{(2)}$ — не зависящей от спина части амплитуды $\hat{f}^{(2)}$, в амплитудах первого приближения $\hat{f}^{(1)}$ в выражении (2) следует учитывать только слагаемые $A^{(1)}$ (вклад в $A^{(2)}$ от «спиновых» слагаемых в обеих амплитудах $\hat{f}^{(1)}$ имеет дополнительную малость $\sim (v/c)^4$). При этом $A^{(2)}$ совпадает с амплитудой рассеяния второго приближения на потенциале $U_0(r)$. Для потенциала Юкавы она была рассчитана в 13.12. С помощью формулы (5) этой задачи получаем (с заменой в ней α на $-Ze^2$)

$$\text{Im} A^{(2)} = \frac{4(Ze^2m)^2}{\hbar^4 k q^2} \ln qR, \quad R \gg 1/k. \quad (3)$$

Для зависящей от спина части амплитуды $f^{(2)}$ согласно (2) и (1) находим

$$\hat{\sigma} \mathbf{v} \text{Im} B^{(2)} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 k \hat{\sigma} \int \frac{[\mathbf{q}\boldsymbol{\kappa}] d\Omega_{\boldsymbol{\kappa}}}{[(\mathbf{k}_0 - \boldsymbol{\kappa})^2 + R^{-2}][(\mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa})^2 + R^{-2}]} \quad (4)$$

($|\boldsymbol{\kappa}| = k = k_0$; о вычислении мнимой части интеграла см., например, 13.11). Входящий сюда интеграл запишем в виде

$$\int \frac{\boldsymbol{\kappa} d\Omega_{\boldsymbol{\kappa}}}{[(\mathbf{k}_0 - \boldsymbol{\kappa})^2 + R^{-2}][(\mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa})^2 + R^{-2}]} = C_1(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}) + C_2 \mathbf{q}. \quad (5)$$

После умножения на $(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})$ получаем

$$(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})^2 C_1 = \frac{1}{2} \int d\Omega_{\boldsymbol{\kappa}} \left\{ -\frac{1}{(\mathbf{k}_0 - \boldsymbol{\kappa})^2 + R^{-2}} - \frac{1}{(\mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa})^2 + R^{-2}} + \frac{4k^2 + 2R^{-2}}{[(\mathbf{k}_0 - \boldsymbol{\kappa})^2 + R^{-2}][(\mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa})^2 + R^{-2}]} \right\}.$$

Интегралы от первых двух слагаемых здесь вычисляются элементарно, а интеграл от третьего слагаемого непосредственно выражается через мнимую часть амплитуды рассеяния $f^{(2)}$ на потенциале Юкавы, см. 13.12; в результате получаем при $kR \gg 1$ (напомним, что $|k| = k$):

$$(k_0 + k)^2 C_1 = 2\pi \left[-\frac{1}{k^2} \ln 2kR + \frac{4}{q^2} \ln qR \right].$$

Замечая, что слагаемое $C_2 q$ в (5) не вносит вклада в значение интеграла (4) и что $(k_0 + k)^2 = 4k^2 \cos^2(\theta/2)$, находим

$$\text{Im } B^{(2)} = \frac{1}{4} \left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{\sin \theta}{\cos^2 \frac{\theta}{2}} \left[\frac{\ln 2kR}{k} - \frac{4k \ln qR}{q^2} \right]. \quad (6)$$

Теперь, используя соотношения (1), (3), (6), по формуле (XIII.24) получаем поляризацию электрона при рассеянии в кулоновском поле ядра:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &\approx \frac{2}{(A^{(1)})^2} \{ \text{Im } A^{(2)} \cdot B^{(1)} - A^{(1)} \text{Im } B^{(2)} \} \mathbf{v} = \\ &= 2 \frac{Ze^2}{\hbar c} \frac{v}{c} \frac{\sin^3(\theta/2)}{\cos(\theta/2)} \ln \left(\sin \frac{\theta}{2} \right) \mathbf{v}; \quad \mathbf{v} = \frac{[\mathbf{k}_0 \mathbf{k}]}{|\mathbf{k}_0 \mathbf{k}|} \end{aligned} \quad (7)$$

(подчеркнем, что радиус обрезания потенциала в окончательный результат не входит).

При рассеянии позитронов вектор поляризации имеет противоположное направление (амплитуда $f^{(1)}$ изменяет знак, а $f^{(2)}$ остается неизменной).

13.63. Решение уравнения Шрёдингера, отвечающее определенным значениям квадрата орбитального момента $l(l+1)$, полного момента $j = l \pm 1/2$ и его проекции j_z , имеет вид

$$\Psi_{kjlj_z} = \tilde{\Psi}_{jlj_z} R_{kjl}(r), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Здесь $\tilde{\Psi}_{jlj_z}$ — спин-угловая часть волновой функции (см. 5.24 и 5.25, однако в данной задаче ее явный вид несуществен). Так как

$$\hat{\sigma} \hat{1} \tilde{\Psi}_{jlj_z} = \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \tilde{\Psi}_{jlj_z},$$

то замечаем, что радиальное уравнение Шрёдингера для R_{kjl} имеет точно такой же вид, как и в случае бесспиновой частицы с орбитальным моментом l в потенциале

$$U_l^\pm(r) = U_0(r) \pm \left(l + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) U_1(r)$$

(верхние и нижние знаки относятся соответственно к значениям $j = l \pm 1/2$). Поэтому замена в выражениях (XIII. 12—XIII. 14) потенциала $U(r)$ на U_l^\pm определяет фазовые сдвиги δ_l^\pm в разложениях (XIII. 25) инвариантных функций амплитуды рассеяния по парциальным волнам в соответствующих приближениях. Так, обобщение выражения (XIII. 14) имеет вид

$$\delta_l^\pm \approx -\frac{m}{2\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} \{U_0(\sqrt{\rho^2 + z^2}) \pm k\rho U_1(\sqrt{\rho^2 + z^2})\} dz, \\ l = \rho k \gg 1.$$

Используя это соотношение, с помощью формул (XIII. 25), как и в случае бесспиновых частиц [1, § 131], можно получить выражения для инвариантных амплитуд A и B в приближении эйконала; при этом полезно иметь в виду, что

$$\sin \theta P_l'(\cos \theta) \approx -\frac{\partial}{\partial \theta} J_0(l\theta) = lJ_1(l\theta); \quad l \gg 1, \quad \theta \ll 1.$$

Особенно наглядно выглядит в эйкональном приближении выражение для амплитуды рассеяния \hat{f} как оператора (матрицы) в пространстве спиновых состояний

$$\hat{f} = \frac{ik}{2\pi} \iint \{1 - \exp[2i\hat{\delta}(k_0, \rho)]\} e^{-i\mathbf{q}\rho} d^2\rho, \quad (1)$$

если ввести оператор квазиклассического фазового сдвига (сравнить с (XIII. 19))

$$\hat{\delta}(k_0, \rho) = -\frac{m}{2\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} \{U_0(\rho, z) + U_1(\rho, z)[\rho k_0] \hat{\sigma}\} dz. \quad (2)$$

С помощью соотношения

$$\exp(i\mathbf{a}\hat{\sigma}\mathbf{v}) = \cos a + i\hat{\sigma}\mathbf{v} \sin a, \quad \text{где } \mathbf{v}^2 = 1,$$

теперь не представляет труда получить эйкональные выражения для амплитуд A и B в формуле (XIII. 22).

13.64. Пусть плоскость реакции есть плоскость (x, z) , причем ось z направлена вдоль импульса p_0 частицы со спином $s=1/2$ в с. с. и. до столкновения. При этом имеет место: $p_0 = (0, 0, p)$, $\mathbf{p} = (p \sin \theta, 0, p \cos \theta)$ и $\mathbf{v} = (0, 1, 0)$, так что $\hat{\sigma}\mathbf{v} = \hat{\sigma}_y$.

Учитывая, что спиральные состояния: Φ_λ — до столкновения и χ_μ — после рассеяния, описываются спинорами (см. 5.20)

$$\Phi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Phi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \\ \chi_{1/2} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{pmatrix},$$

находим спиральные амплитуды $f_{\lambda\mu} = \chi_{\mu}^* f_{\Phi\lambda}$:

$$f_{1/2, 1/2} = f_{-1/2, -1/2} = \cos(\theta/2) \cdot A - \sin(\theta/2) \cdot B,$$

$$f_{1/2, -1/2} = -f_{-1/2, 1/2} = -\sin(\theta/2) \cdot A - \cos(\theta/2) \cdot B.$$

13.65. Волновая функция относительного движения сталкивающихся бесспиновых частиц на больших расстояниях имеет вид

$$e^{ikz} \approx \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) \frac{1}{2kr} \{e^{-i(kr-\pi l/2)} - e^{i(kr-\pi l/2)}\}.$$

Слагаемое $i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) e^{-i(kr-\pi l/2)}/2kr$ этой суммы описывает состояние сталкивающихся частиц (до взаимодействия) с моментом $j=l$, четностью $I_l = (-1)^l$ и проекцией момента на ось z , направленную вдоль импульса $\mathbf{p}_0 = \hbar\mathbf{k}$, равной нулю, т. е. $j_z = l_z = 0$. Возникающие при этом в результате взаимодействия частицы в рассматриваемом канале реакции на большом относительном расстоянии r_1 друг от друга будут описываться расходящейся волной вида

$$\eta_l(E) \Phi_{j=l, I_l, j_z=0}(\mathbf{n}_1) \frac{1}{r_1} e^{ik_1 r_1}, \quad \mathbf{n}_1 = \frac{\mathbf{r}_1}{r_1}. \quad (1)$$

Здесь $\Phi_{j l j_z}(\mathbf{n})$ описывает спин-угловую зависимость в.ф. разлетающихся частиц в состоянии с соответствующими квантовыми числами; величина параметра η_l определяется интенсивностью взаимодействия. Для определения явного вида $\Phi(\mathbf{n}_1)$ замечаем, что орбитальный момент в конечном состоянии совпадает с исходным l . Действительно, при полном моменте $j=l$ и спине $s=1$ орбитальный момент может принимать лишь значения $l' = l, l \pm 1$; при этом с учетом значения четности состояния следует, что $l' = l$ (причем $l \neq 0$). Поэтому

$$\Phi_{l l 0}(\mathbf{n}_1) = \sum_{m=0, \pm 1} C_{l m; 1, -m}^{l 0} Y_{l m}(\mathbf{n}_1) \chi_{-m} \quad (2)$$

Используя здесь выражения для шаровых функций Y_{lm} , компонент вектора χ_m (см. 3.41) и коэффициентов Клебша — Гордана:

$$Y_{l, \pm 1} = \mp i^l \left[\frac{2l+1}{4\pi l(l+1)} \right]^{1/2} \sin\theta P'_l(\cos\theta) e^{\pm i\varphi},$$

$$\chi_{\pm 1} = \mp \frac{i}{\sqrt{2}} (1, \pm i, 0); \quad C_{l, \pm 1; 1, \mp 1}^{l 0} = \mp (-1)^l \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$C_{l 0, 10}^{l 0} = 0,$$

приводим выражение (2) к виду

$$\Phi_{ll_1 0} = \gamma_l \sin \theta_1 P'_l(\cos \theta_1) (-\sin \varphi_1, \cos \varphi_1, 0),$$

где

$$\gamma_l = (-i)^l [(2l + 1)/4\pi l(l + 1)]^{1/2}.$$

Замечая, что вектор с компонентами $\sin \theta_1 (-\sin \varphi_1, \cos \varphi_1, 0)$ равен $[\mathbf{p}_0 \mathbf{p}_1]/p_0 p_1$, и выполняя суммирование по l , приходим к выражению для векторной амплитуды «рассеянной» волны — коэффициенту перед $e^{ik_1 r_1}/r_1$ в асимптотике волновой функции при $r_1 \rightarrow \infty$ в рассматриваемом канале реакции

$$\Phi(\mathbf{n}_1) = f(E, \theta) [\mathbf{p}_0 \mathbf{p}_1], \quad f(E, \theta) = \sum_l \tilde{\eta}_l(E) P'_l(\cos \theta), \quad (3)$$

здесь $\tilde{\eta}_l(E) = \eta_l(E) \gamma_l / p_0 p_1$. При этом дифференциальное сечение реакции, просуммированное по спиновым состояниям, $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{v_1}{v_0} |\Phi|^2$, где $v_{0,1}$ — скорости относительного движения частиц в начальном и конечном состоянии. Полное сечение реакции

$$\sigma_r = \sum_l \sigma_{r,l}; \quad \sigma_{r,l} = \frac{v_1}{v_0} |\gamma_l|^{-2} p_0^2 p_1^2 |\tilde{\eta}_l|^2 = \frac{v_1}{v_0} |\eta_l(E)|^2.$$

Из условия унитарности S -матрицы вытекает ограничение на парциальные сечения реакции: $\sigma_{r,l} \leq (2l + 1) \pi/k_0^2$, см. [1, § 142].

Амплитуда реакции с образованием частицы с $s = 1$ в конкретном спиновом состоянии, описываемом вектором поляризации \mathbf{a} , определяется выражением

$$\langle f | \hat{f} | i \rangle = \mathbf{a}^* \Phi = f(E, \theta) \mathbf{a}^* [\mathbf{p}_0 \mathbf{p}_1]. \quad (4)$$

Оно очевидно заранее (и не требует проведенного выше исследования) из соображений о скалярном характере амплитуды реакции, так как представляет единственно возможную скалярную комбинацию, которую можно образовать из векторов \mathbf{p}_0 , \mathbf{p}_1 и \mathbf{a} (причем в силу принципа суперпозиции вектор поляризации должен входить линейно). При этом следует учесть, что \mathbf{a} является аксиальным вектором (псевдовектором), так как при инверсии $\hat{\mathbf{I}} \mathbf{a} = +\mathbf{a}$ ввиду положительной внутренней четности частицы с $s = 1$. Заметим, что согласно (4) частица с $s = 1$, образующаяся в рассматриваемой реакции, оказывается линейно-поляризованной в направлении, перпендикулярном плоскости реакции (проекция спина на это направление имеет определенное, равное нулю, значение).

В случае реакции, когда частица со спином $s = 1$ имеет отрицательную внутреннюю четность, ее вектор поляризации \mathbf{v} является полярным вектором (так как при инверсии $\hat{I}\mathbf{v} = -\mathbf{v}$). Соответственно теперь из условия скалярности амплитуды перехода следует, что ее спиновая структура имеет вид ⁴⁰⁾

$$\langle f | \hat{f} | i \rangle = \mathbf{v}^* \{f_1(E, \theta) \mathbf{p}_0 + f_2(E, \theta) \mathbf{p}_1\}. \quad (5)$$

Появление здесь двух инвариантных амплитуд $f_{1,2}$ связано с тем, что при данном орбитальном моменте l сталкивающихся частиц орбитальный момент частиц в конечном состоянии может принимать два значения: $l' = l \pm 1$.

13.66. В борновском приближении амплитуда рассеяния описывается выражением (сравнить с 13.7 и 13.8)

$$\hat{f} = \sum_n \{A_0(q) + iB_0(q) \hat{\sigma}_n \mathbf{v}\} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{a}_n); \quad (1)$$

здесь \mathbf{a}_n — радиус-вектор n -го центра; вещественные функции $A_0(q)$ и $B_0(q)$ определяются формулами из 13.59.

Дифференциальное сечение рассеяния, усредненное по начальному спиновому состоянию рассеивающих центров и просуммированное по их конечным спиновым состояниям, имеет вид

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle &= A_0^2(q) \left| \sum_n e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}_n} \right|^2 + 2A_0(q) B_0(q) \times \\ &\times \sum_{k \neq n} \mathbf{P}_n \mathbf{v} \sin(\mathbf{q}(\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_k)) + NB_0^2(q) + \\ &+ B_0^2(q) \sum_{k \neq n} \overline{(\sigma_n \mathbf{v}) (\sigma_k \mathbf{v})} \cos(\mathbf{q}(\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_k)), \quad (2) \end{aligned}$$

где черта означает усреднение по исходному спиновому состоянию центров. Если между состояниями отдельных центров нет корреляции, то

$$\overline{(\sigma_n \mathbf{v}) (\sigma_k \mathbf{v})} = (\mathbf{P}_n \mathbf{v}) (\mathbf{P}_k \mathbf{v}), \quad n \neq k,$$

и в случае неполяризованных центров, $\mathbf{P}_n = 0$, из всех слагаемых в выражении (2) отличны от нуля лишь первое и третье. Первое из них определяется не зависящей от спина частью $U_0(r)$ взаимодействия и имеет такой же вид, как и в случае рассеяния на

⁴⁰⁾ При этом, как и в предыдущем случае, существенно, что все остальные бесспиновые частицы, участвующие в реакции, имеют положительную внутреннюю четность (точнее: должно быть положительным их произведение; в противном случае выражения (4) и (5) должны быть взаимно заменены друг другом).

бессипновых центрах, сравнить с 13.8. Слагаемое же $NB_0^2(q)$ определяется спин-орбитальным взаимодействием. Характерная его особенность — пропорциональность числу рассеивающих центров — указывает на некогерентность рассеяния. Дело в том, что это слагаемое отвечает рассеянию, при котором происходит «переворот» спина рассеивающего центра (так что можно указать, на каком именно центре произошло рассеяние; в таких условиях интерференция не возникает, см. [13]).

13.67. Из условия унитарности S -матрицы следует оптическая теорема

$$\text{Im} \langle \mathbf{p}, \alpha | f | \mathbf{p}, \alpha \rangle = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}(\mathbf{p}, \alpha),$$

где $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ — импульс относительного движения сталкивающихся частиц, а α характеризует их спиновое состояние, так что в левую часть равенства входит мнимая часть амплитуды упругого рассеяния вперед, $\theta = 0$, без изменения спинового состояния частиц, а в правую часть — полное сечение рассеяния (включая неупругие столкновения) из того же спинового состояния.

13.68. Амплитуда рассеяния на потенциале нулевого радиуса действия (см. 13.20)

$$f(E) = \frac{1}{-1/a_0 - (i/\hbar) \sqrt{2mE}}. \quad (1)$$

Как аналитическая функция комплексной переменной E она имеет точки ветвления $E = 0$ и ∞ и полюс в точке E_0 , для которой $E_0 = -\hbar^2/2ma_0^2$. Проведя, как обычно,

разрез вдоль вещественной полуоси, см. рис. 51, и выбирая фазу на верхнем берегу разреза равной $\varphi = 0$, замечаем, что полюс E_0 находится на физическом листе при $a_0 > 0$ и соответствует связанному состоянию, существующему при этом в потенциале нулевого радиуса (сравнить с 2.30). В случае $a_0 < 0$ полюс находится на нефизическом листе и отвечает виртуальному уровню.

Рассмотрим взятый по контуру C на рис. 51 интеграл

$$\frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{f(E') dE'}{(E' - E)}. \quad (2)$$

Используя теорему Коши и устремляя радиус окружности контура к бесконечности, $R_E \rightarrow \infty$, в случае $a_0 > 0$ получаем

$$f(E) = -\frac{\hbar^2}{ma_0(E - E_0)} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\text{Im} f(E') dE'}{E' - E}. \quad (3)$$

Здесь также учтено, что величина скачка амплитуды на разрезе (при $E' > 0$) совпадает с $2i \text{Im} f(E')$ (на нижнем берегу разреза $\sqrt{E} = -|\sqrt{E}|$) и что значение интеграла определяется вкладом двух полюсов: в точках E и E_0 .

В случае $a_0 < 0$ полюс E_0 находится уже на нефизическом листе. Он не вносит вклада в значение интеграла (2) и теперь дисперсионное соотношение имеет аналогичный (3) вид, но уже без полюсного слагаемого.

Дисперсионное соотношение в случае потенциала нулевого радиуса можно подтвердить непосредственным вычислением. Подставив мнимую часть амплитуды рассеяния (1), равную

$$\text{Im} f(E) = \sqrt{\frac{\hbar^2 E}{2m}} \frac{1}{|E_0| + E}, \quad E > 0,$$

в интеграл в выражении (3) и вычислив его, получаем

$$\begin{aligned} \tilde{f}(E) &= \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{E'} dE'}{(E' - E)(|E_0| + E')} = \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{|E_0|} - i\sqrt{E}}, \end{aligned}$$

что в случае $a_0 < 0$ (в отсутствие связанного состояния) совпадает с амплитудой рассеяния (1). В случае же $a_0 > 0$ приходим к амплитуде рассеяния после добавления, согласно (3), полюсного слагаемого.

Установленные дисперсионные соотношения отличаются от (XIII.27) отсутствием борновского слагаемого $f_B \propto \int U dV$. Это имеет простое объяснение. Потенциал нулевого радиуса можно получить из потенциала конечного радиуса R предельным переходом $R \rightarrow 0$, при котором $U_0 R^2 = \text{const}$, так что при этом $f_B \propto U_0 R^3 \rightarrow 0$. В потенциале конечного радиуса амплитуда рассеяния в пределе $E \rightarrow \infty$ совпадает с борновской и для обращения в нуль интеграла в (2) по окружности бесконечного радиуса из f надо вычесть f_B ; для потенциала нулевого радиуса амплитуда рассеяния сама обращается в нуль при $E \rightarrow \infty$.

В заключение отметим, что вычет в полюсе $E = E_0$ в выражении (3) равен $-\hbar^2/ma_0 = -\hbar^2 A^2/2m$. При этом $A = \sqrt{2/a_0} =$

$= \sqrt{2\kappa_0}$ совпадает с нормировочным коэффициентом в волновой функции

$$\Psi_0 = A \exp(-\kappa_0 r) / \sqrt{4\pi r}$$

связанного состояния в потенциале нулевого радиуса, см. 4.10, в согласии с (XIII.27) и (XIII.28).

13.69. Так как согласно оптической теореме $\text{Im} f(E, 0) = -k\sigma(E)/4\pi$, то из дисперсионного соотношения (XIII.27) при энергии $E = 0$ следует

$$f(E=0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) dV + \frac{\sqrt{2m}}{4\pi^2\hbar} \int_0^\infty \frac{\sigma(E) dE}{\sqrt{E}}. \quad (1)$$

Здесь также учтено, что в отталкивательном потенциале, $U(r) \geq 0$, нет связанных состояний. Отсюда, ввиду того, что в таком потенциале $f(E=0) < 0$ (см. 13.16 и 13.31), сразу приходим к приведенному в условии задачи неравенству.

Заметим, что в случае «слабого» потенциала, $U_0 \ll \hbar^2/mR^2$, рассматриваемое неравенство представляется достаточно очевидным (так как $f \propto U_0$, а $\sigma \propto U_0^2$) и должно выполняться с большим «запасом». Однако для «сильного» отталкивательного потенциала, $U_0 \gg \hbar^2/mR^2$, уже ⁴¹⁾ $|f_V| \gg |f(E=0)|$ и значения обеих частей неравенства близки друг к другу, так что в этом случае

$$\int_0^\infty \frac{\sigma(E)}{\sqrt{E}} dE \approx 4\pi^2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^\infty U(r) r^2 dr. \quad (2)$$

В заключение укажем, что из соотношения (1) следует полученный ранее в 13.16 другим способом результат о том, что в отталкивательном потенциале борновское приближение при энергии $E = 0$ дает завышенное значение сечения рассеяния.

13.70. Пока в потенциале притяжения нет связанных состояний, справедливо соотношение (1) из предыдущей задачи, однако теперь все три слагаемых в нем уже положительные. Отсюда, в частности, следует результат из 13.16 для потенциала притяжения. Далее, отмеченное в условии задачи неравенство в случае «слабого» потенциала должно выполняться с большим запасом, сравнить с предыдущей задачей. Однако при приближении потенциала к «критическому», когда появляется связанное состояние, имеем $f(E=0) \rightarrow \infty$; при этом $f(E=0) \gg f_V$

⁴¹⁾ Так, для прямоугольного потенциального барьера радиуса R при $U_0 \rightarrow \infty$ имеем также и $|f_V| \rightarrow \infty$, в то время как при этом $f(E=0) = -R = \text{const}$.

и значения обеих частей неравенства уже близки друг к другу, так что

$$\int_0^{\infty} \frac{\sigma(E)}{\sqrt{E}} dE \approx \pi \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m}} \sigma(0). \quad (1)$$

Впрочем, это соотношение в случае существования в потенциале «мелкого» реального или виртуального s -уровня достаточно очевидно заранее. Согласно (XIII.16) при этом в области малых энергий сечение рассеяния

$$\sigma(E) \approx 2\pi\hbar^2/m (E + \epsilon_0), \quad \epsilon_0 \ll \hbar^2/mR^2$$

аномально велико. Именно эта область вносит доминирующий вклад в значение интеграла; вычислив его, убеждаемся в справедливости соотношения (1).

13.71. Итерационная процедура вычисления амплитуды рассеяния $f = \sum_n f^{(n)}$ рассматриваемым способом состоит в следующем. Сначала по известной амплитуде первого приближения, $f^{(1)} = f_B$, с помощью условия унитарности (XIII.26) находим мнимую часть амплитуды второго приближения ⁴²⁾ $\text{Im} f^{(2)}(E, q^2)$, а затем, используя дисперсионное соотношение при $q^2 \neq 0$ (аналогичное (XIII.27)), и всю амплитуду $f^{(2)}$ в целом. Подобным образом вычисляются и члены более высоких приближений.

В частности, при значении $q^2 = 0$ таким способом сразу находим

$$f^{(2)}(E, q^2 = 0) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} \frac{dE'}{\sqrt{E'}(E' - E)} \int_0^{4E'} f_B^2(x) dx. \quad (1)$$

Здесь мнимая часть амплитуды рассеяния с помощью оптической теоремы выражена через сечение рассеяния в борновском приближении и во избежание загромождения формул использована система единиц $\hbar = 2m = 1$, при этом $E = k^2$. Борновская амплитуда f_B записана в виде $f_B(q^2)$.

С другой стороны, во втором порядке теории возмущений согласно результату из 13.10 имеем

$$\begin{aligned} f^{(2)}(E, q^2 = 0) &= \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{f_B^2((\mathbf{k}_0 - \mathbf{x})^2)}{\mathbf{x}^2 - E} d^3\mathbf{x} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{\mathbf{x} d\mathbf{x}}{\sqrt{E}(\mathbf{x}^2 - E)} \int_{(\mathbf{x}-\sqrt{E})^2}^{(\mathbf{x}+\sqrt{E})^2} f_B^2(x) dx. \end{aligned} \quad (2)$$

⁴²⁾ При этом, в принципе, получающееся выражение определяет мнимую часть амплитуды и при «нефизических» значениях энергии $0 < E < \hbar^2 q^2/8m$.

Для доказательство равенства приведенных выражений выполним во втором из них следующие преобразования (заметим, что при $E \rightarrow 0$ равенство становится очевидным, если в соотношении (1) выполнить интегрирование по частям). Прежде всего «внутренний» интеграл в формуле (2) разобьем на два, с точкой $x = 0$ в качестве одного из пределов интегрирования. Далее, в первом из получающихся при этом слагаемых сделаем подстановку $2\kappa' = \kappa + \sqrt{E}$, а во втором $2\kappa' = \kappa - \sqrt{E}$. В возникающих интегралах по κ' опять разобьем области интегрирования на две: одну в пределах от 0 до ∞ , а вторую — в пределах от 0 до $\pm \sqrt{E}/2$. Вклады вторых областей интегрирования взаимно сокращаются, а сумма вкладов первых из них после подстановки $E' = (\kappa')^2$ воспроизводит формулу (1).

13.72. В разложении амплитуды рассеяния (XIII.9) по парциальным волнам имеем неравенство $|\varphi_l| \leq 1/k$, так что в соответствии с условием задачи получаем

$$|f(k, \theta)| \leq \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{L_0} (2l+1) |P_l(\cos \theta)|. \quad (1)$$

Отсюда, заменяя суммирование интегрированием, для углов $\theta = 0$ и π находим

$$|f| \leq L_0^2/k = kR^2, \quad \theta = 0; \pi. \quad (2)$$

Для углов рассеяния θ , не слишком близких к 0 и π , имеем (см. [1, § 49])

$$|P_l(\cos \theta)| \leq (2/\pi l \sin \theta)^{1/2}$$

и аналогичным образом получаем

$$f(k, \theta) \leq \frac{4}{3} \left(\frac{2}{\pi \sin \theta} \right)^{1/2} R(kR)^{1/2}. \quad (3)$$

Заметим, что из-за осцилляции полиномов Лежандра при $\theta \neq 0$ такое ограничение для произвольного угла рассеяния представляется слишком слабым и должно выполняться с большим запасом. Действительно, вытекающее из неравенства (3) ограничение на величину полного сечения упругого рассеяния, $\sigma_{el} = \int |f|^2 d\Omega \leq CR^2 \cdot kR$, вообще не представляет интереса, так как заведомо $\sigma_{el} \leq \sigma_{tot} \leq 4\pi R^2$, а значение $kR \gg 1$.

13.73. Из выражений для парциальных сечений (полного и упругого рассеяния)

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

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

следует, что при заданном значении $\sigma_{\text{tot}}^{(l)}$ величина $\sigma_{\text{el}}^{(l)}$ минимальна при $\text{Im } S_l = 0$. Соответственно

$$\sigma_{\text{el}} = \sum_l \sigma_{\text{el}}^{(l)} \geq \tilde{\sigma}_{\text{el}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{L_0} (2l+1) (1 - \alpha_l)^2,$$

где $\alpha_l = \text{Re } S_l$. Для отыскания минимального значения $\tilde{\sigma}_{\text{el}}$ как функции переменных α_l при заданной величине $\sigma_{\text{tot}} = \sum_l \sigma_{\text{tot}}^{(l)}$ воспользуемся методом неопределенных множителей Лагранжа и введем $A(\alpha_l) = \tilde{\sigma}_{\text{el}} - \lambda \sigma_{\text{tot}}$. Из условий экстремума (теперь все переменные α_l можно варьировать независимо) для $A(\alpha_l)$ находим $\alpha_l = \text{const} = \alpha$ (не зависят от l). Заменяя суммирование по l интегрированием и исключая α из выражений для σ_{el} и σ_{tot} , получаем неравенство

$$\sigma_{\text{el}} \geq \min \tilde{\sigma}_{\text{el}} = \frac{1}{4\pi R^2} \sigma_{\text{tot}}^2. \quad (1)$$

Как отмечалось в 13.53, в теории сильных взаимодействий элементарных частиц установлено ограничение на возможный рост радиуса R взаимодействия с увеличением энергии:

$$R \leq R_0 \ln(E/E_0) \quad \text{при } E \rightarrow \infty, \quad (2)$$

так что неравенство (1) принимает вид

$$\sigma_{\text{el}}(E) \geq C \sigma_{\text{tot}}^2(E) / \ln^2 \left(\frac{E}{E_0} \right). \quad (3)$$

13.74. Обозначив $S_l = |S_l| e^{2i\delta_l}$, имеем для парциальных амплитуд в (XIII.9) выражения

$$\text{Im } \varphi_l = \frac{1}{2k} (1 - |S_l| \cos 2\delta_l), \quad \text{Re } \varphi_l = \frac{1}{2k} |S_l| \sin 2\delta_l.$$

При заданном значении $\text{Im } \varphi_l$ величина $|\text{Re } \varphi_l|$ максимальна при $|S_l| = 1$ (в этом случае неупругое рассеяние отсутствует и $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}}$), так что, записав $\text{Im } \varphi_l = (1 - \alpha_l)/2k$, получаем

$$|\text{Re } f(E, 0)| \leq \sum_l (2l+1) |\text{Re } \varphi_l| \leq \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{L_0} (2l+1) \sqrt{1 - \alpha_l^2}.$$

Поступая как и в предыдущей задаче, приходим к следующему ограничению на вещественную часть амплитуды упругого рассеяния вперед при заданных полном сечении рассеяния и радиусе взаимодействия:

$$\begin{aligned} |\text{Re } f(E, 0)| &\leq \\ &\leq \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\sigma_{\text{tot}}} kR \left(1 - \frac{\sigma_{\text{tot}}}{4\pi R^2}\right)^{1/2} \leq \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\sigma_{\text{tot}}} kR. \quad (1) \end{aligned}$$

Отсюда, учитывая, что $\sigma_{\text{tot}} \leq 4\pi R^2$, и ограничение на рост радиуса взаимодействия с увеличением энергии, см. предыдущую задачу, получаем

$$|f(E, 0)| \leq Ck \sqrt{\sigma_{\text{tot}}(E)} \ln \left(\frac{E}{E_0} \right) \quad (2)$$

(здесь для мнимой части амплитуды рассеяния использована оптическая теорема).

Как отмечалось, ограничение (1) предполагает отсутствие неупругих процессов. Аналогичным образом (с помощью метода неопределенных множителей Лагранжа) можно получить менее жесткое ограничение на амплитуду рассеяния при заданных значениях как полного σ_{tot} , так и неупругого σ_{inel} сечений столкновения.

13.75. Так как для полиномов Лежандра $P'_l(1) = l(l+1)/2$ то с помощью разложения амплитуды рассеяния по парциальным волнам (XIII.9) при высоких энергиях получаем

$$\frac{d}{d \cos \theta} \text{Im} f(E, \theta) \Big|_{\theta=0} \approx \sum_l l^3 \text{Im} \varphi_l. \quad (1)$$

Имея в виду, что $\text{Im} \varphi_l \leq 1/k$, замечаем, что при заданном полном сечении рассеяния, а следовательно, и мнимой части амплитуды рассеяния $\text{Im} f(E, 0)$ (ввиду оптической теоремы), величина суммы (1) принимает минимальное значение, если

$$\text{Im} \varphi_l = \begin{cases} \frac{1}{k}, & l \leq L_1, \\ 0, & l > L_1. \end{cases} \quad (2)$$

При этом значение L_1 определяется величиной полного сечения взаимодействия

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \sum_l (2l+1) \text{Im} \varphi_l \approx \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{L_1} l.$$

Заменяя суммирование по l интегрированием, получаем $L_1^2 = k^2 \sigma_{\text{tot}} / 4\pi$ и приходим к следующему ограничению:

$$-\frac{d}{dq^2} \text{Im} f(E, q^2) \Big|_{q^2=0} \geq \frac{1}{128\pi^2} k \sigma_{\text{tot}}^2(E). \quad (3)$$

Подчеркнем, что соотношения (2) соответствуют «насыщению» полного сечения рассеяния за счет низших парциальных волн. При этом $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}}$ (нет неупругих процессов) и более того, для $l \leq L_1$ все фазы $\delta_l = \pi/2$, так что ограничение (3) должно выполняться с большим запасом.

Аналогичным образом замечаем, что максимальное значение суммы в выражении (1) принимает в случае, когда полное сечение рассеяния насыщается за счет высших парциальных волн и

$$\operatorname{Im} \varphi_l = \begin{cases} 0, & l < L_2, \\ 1/k, & L_2 \leq l \leq L_0 = kR. \end{cases}$$

Теперь приходим к следующему ограничению (уже сверху):

$$-\frac{d}{dq^2} \operatorname{Im} f(E, q^2) \Big|_{q^2=0} \leq \frac{kR^2 \sigma_{\text{tot}}}{16\pi} \left(1 - \frac{\sigma_{\text{tot}}}{8\pi R^2}\right) \leq \frac{kR^2 \sigma_{\text{tot}}}{16\pi}. \quad (4)$$

Для амплитуды дифракционного рассеяния на непрозрачной сфере радиуса R (см. 13.57 и 13.90)

$$f_{\text{дифр}} = i \frac{kR}{q} J_1(qR)$$

отмеченные в условии задачи ограничения, являющиеся непосредственным следствием соотношений (3) и (4), принимают вид следующего неравенства (после сокращения на $R^2/4$): $1/4 < < 1/2 < 1$.

В заключение подчеркнем, что, как отмечалось выше, ограничения (3) и (4) предполагают отсутствие неупругих процессов. С помощью метода Лагранжа, как и в 13.73, можно получить менее жесткие ограничения при заданных независимым образом значениях как полного, так и неупругого сечений столкновения.

13.76. В условиях применимости эйконального приближения существенны лишь малые углы рассеяния. В этой области углов правая часть соотношения (XIII.26) с учетом эйконального выражения (XIII.18) для амплитуды рассеяния может быть преобразована к виду

$$\frac{ik}{2\pi} \iint [S^*(\rho) - 1][S(\rho) - 1] \exp(-iq_{\perp}\rho) d^2\rho \quad (1)$$

(для выполнения интегрирования по углам, приводящего к формуле (1), следует воспользоваться соотношениями

$$\begin{aligned} k - k_0 &\approx q_{\perp}, & k' - k_0 &\approx q'_{\perp}, & k' - k &\approx q'_{\perp} - q_{\perp}, \\ d\Omega' &\approx \frac{1}{k^2} d^2q'_{\perp}; \end{aligned}$$

хотя $q_{\perp}, q'_{\perp} \ll k$, но ввиду быстрого убывания подынтегральной функции по q'_{\perp} можно интегрировать в бесконечных пределах)

Теперь, используя для $S(\rho)$ выражение (XIII.19), замечаем соотношение

$$[S^*(\rho) - 1][S(\rho) - 1] = [1 - S(\rho)] - [S^*(\rho) - 1],$$

так что (1) принимает вид $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) - f^*(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})$, что и доказывает унитарность амплитуды рассеяния в эйкональном приближении. Отсюда, в частности, согласно оптической теореме следует выражение для сечения рассеяния быстрых частиц, обсуждавшееся ранее в 13.51.

13.77. Взаимодействие налетающего электрона с атомом имеет вид (\mathbf{r}_a — радиус-векторы атомных электронов)

$$U(\mathbf{r}, \{\mathbf{r}_a\}) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_a \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|}.$$

Амплитуда упругого рассеяния электрона на атоме в борновском приближении в пренебрежении обменными эффектами, играющими роль, аналогичную поправкам более высокого приближения⁴³), описывается подобным (XIII.6) выражением:

$$f_B = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \Psi_0^*(\xi_a) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}, \{\mathbf{r}_a\}) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \Psi_0(\xi_a) dV d\tau_{\xi} \quad (1)$$

(интегрирование по ξ_a включает и суммирование по спиновым переменным атомных электронов). Выполняя в нем интегрирование по ξ_a и учитывая, что

$$\varphi_{ат}(\mathbf{r}) = \int \left(\frac{Ze}{r} - \sum_a \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} \right) |\Psi_0(\xi_a)|^2 d\tau \quad (2)$$

определяет среднее значение электростатического потенциала, создаваемого атомом, замечаем, что выражение (1) принимает вид формулы (XIII.6) для амплитуды рассеяния в борновском приближении для локального потенциала $U(\mathbf{r}) = -e\varphi_{ат}(\mathbf{r})$. Приложения ее рассмотрены в задачах 13.4—13.6.

13.78. Гамильтониан системы (с бесконечно тяжелым ядром-протоном) описывается выражением

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

При этом проекции спинов s_z для каждого электрона сохраняются и электроны с $s_z = +1/2$ и $s_z = -1/2$ можно рассматривать как различные частицы (антисимметризация волновой функции не отражается на результатах). Соответственно, обозначив через e_1 электрон с $s_z = +1/2$, а e_2 — электрон с $s_z = -1/2$, замечаем, что рассматриваемый процесс

$$e_1 + (e_2p) \rightarrow e_2 + (e_1p), \quad (1)$$

где символ $(e_{a}p)$ соответствует атому водорода с электроном e_a ,

⁴³) Сравнить с 13.78.

является процессом с *перераспределением* частиц, в котором начальный и конечный каналы реакции — различные.

Амплитуды таких процессов выражаются через матричные элементы соответствующего T -оператора, который может быть записан в двух различных видах (см., например, главу 18 в [25]):

$$\hat{T}_1 = V_\alpha + V_\beta \frac{1}{E - \hat{H} + i0} V_\alpha, \quad (2a)$$

$$\hat{T}_2 = V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - \hat{H} + i0} V_\alpha, \quad (26)$$

где α, β нумеруют каналы реакции, $V_{\alpha, \beta}$ описывают взаимодействие разлетающихся комплексов — потенциалы взаимодействия — в каждом из них (α — начальный, β — конечный каналы; отметим, что хотя $\hat{T}_1 \neq \hat{T}_2$, тем не менее амплитуды реакции $\langle \beta | \hat{T}_{1, 2} | \alpha \rangle$ совпадают).

В дальнейшем мы будем использовать для плоских волн $\Psi_p = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$ относительного движения в каждом из двухчастичных каналов ⁴⁴⁾ нормировку на единичную плотность вероятности. При этом дифференциальное сечение процесса связано с элементом T -матрицы $\langle \beta | \hat{T} | \alpha \rangle$ соотношением

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu_1 \mu_2}{(2\pi)^2 \hbar^4} \frac{p_2}{p_1} |\langle \beta | \hat{T} | \alpha \rangle|^2,$$

где $p_{1, 2}$ и $\mu_{1, 2}$ — импульсы относительного движения и приведенные массы для сталкивающихся (разлетающихся) частиц в каналах α, β ; $d\Omega$ — элемент телесного угла рассеяния в с.ц.и. Обычно используемая амплитуда упругого рассеяния ($\mu_1 = \mu_2, p_1 = p_2$) связана с T -матрицей соотношением

$$f = - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \alpha | \hat{T} | \alpha \rangle.$$

Такое же соотношение справедливо и в случае неупругих столкновений, если $\mu_1 \approx \mu_2, p_1 \approx p_2$.

Воспользовавшись выражением (2a), рассчитаем амплитуду процесса (1) в первом борновском приближении, т. е. ограничиваясь слагаемым V_α в \hat{T}_1 . В данном случае $V_\alpha = -e^2/r_1 + e^2/|r_1 - r_2|$ и амплитуда рассматриваемого процесса

⁴⁴⁾ Именно они (а не расходящиеся или сходящиеся волны!) в произведении с волновыми функциями связанных состояний, соответствующих составным частицам в каналах, сравнить с выражением (3), фигурируют в матричных элементах $\langle \beta | \hat{T} | \alpha \rangle$, определяющих амплитуды реакций.

с «переворотом» спинов электронов принимает вид

$$f_{\downarrow\uparrow, \uparrow\downarrow} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \Psi_0^*(r_1) e^{-i\mathbf{p}_2 r_2/\hbar} \left[\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{r_1} \right] \times \\ \times e^{i\mathbf{p}_1 r_1/\hbar} \Psi_0(r_2) dV_1 dV_2, \quad (3)$$

где $\mathbf{p}_{1,2}$ — импульсы падающего и рассеянного электронов, $\Psi_0(r)$ — в. ф. основного состояния атома водорода. Воспользовавшись импульсным представлением (ниже используем атомные единицы $e = \hbar = m = 1$)

$$U(r) = \frac{1}{r} = \int e^{i\mathbf{x}r} \tilde{U}(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}, \\ \Psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{x}r} \varphi_0(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}, \\ \tilde{U}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi^2 x^2}, \quad \varphi_0(\mathbf{x}) = \frac{\sqrt{8}}{\pi(1+x^2)^2},$$

выражение (3) можно преобразовать к виду

$$-(2\pi)^2 \left\{ \int \varphi_0^*(\mathbf{p}_1 + \mathbf{x}) \varphi_0(\mathbf{p}_2 + \mathbf{x}) \tilde{U}_{12}(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} + \right. \\ \left. + \varphi_0(\mathbf{p}_2) \int \varphi_0^*(\mathbf{p}_1 + \mathbf{x}) \tilde{U}_{e_p}(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} \right\}. \quad (4)$$

Так как $p_{1,2} \gg 1$ (как необходимое условие применимости борновского приближения), а $\varphi_0(p)$ при $p \rightarrow \infty$ убывает быстрее, чем $U(p)$, то замечаем, что доминирующую роль в интегралах (4) играют области интегрирования, в которых аргумент одной из волновых функций $\varphi_0(\tilde{\mathbf{x}})$ порядка 1. При этом в обоих интегралах $\mathbf{x} \approx |\mathbf{p}_{1,2}| \equiv p$ и можно вынести из-под интегралов $U(p)$, после чего они легко вычисляются (сравнить с 4.17):

$$\int \varphi_0^*(\mathbf{p}_1 + \mathbf{x}) \varphi_0(\mathbf{p}_2 + \mathbf{x}) d^3\mathbf{x} = \\ = \int \varphi_0^*(\mathbf{x}') \varphi_0(\mathbf{q} + \mathbf{x}') d^3\mathbf{x}' = \int \varphi_0^*(\mathbf{x}') \hat{T}_{\mathbf{q}} \varphi_0(\mathbf{x}') d^3\mathbf{x}' = \\ = \int e^{-i\mathbf{q}r} |\Psi_0(r)|^2 dV = \frac{16}{(4+q^2)^2}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1$$

(интеграл сводится к формфактору основного состояния атома водорода) и

$$\int \varphi_0^*(\mathbf{p}_1 + \mathbf{x}) d^3\mathbf{x} = (2\pi)^{3/2} \Psi_0^*(0) = \sqrt{8} \pi.$$

В результате получаем амплитуду рассматриваемого процесса

$$f_{\downarrow\uparrow, \uparrow\downarrow}(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1) = -\frac{32}{p^2} \left\{ \frac{1}{(4+q^2)^2} - \frac{1}{2(1+p^2)^2} \right\}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1 \quad (5)$$

Отсюда видно, что доминирующую роль в рассеянии играет область значений $q \lesssim 1$, т. е. углов рассеяния $\theta \lesssim 1/p$. При этом второе слагаемое в выражении (5) пренебрежимо мало, так что дифференциальное, $d\sigma/d\Omega = |f|^2$, и полное сечения рассеяния оказываются равными

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4}{p^4 (1 + p^2\theta^2/4)^4}, \quad \theta \lesssim \frac{1}{p}; \quad \sigma = \frac{16\pi}{3p^6} = \frac{16\pi a_B^2}{3(ka_B)^6} \quad (6)$$

(заменяв $d\Omega$ на $2\pi\theta d\theta$, можно интегрировать по θ в пределах от 0 до ∞ ввиду быстрой сходимости интеграла).

Сделаем несколько заключительных замечаний.

1) Сечение рассеяния электрона на атоме водорода с «переворотом» спинов, представляющего фактически неупругий процесс, при больших энергиях много меньше сечения упругого рассеяния $\sigma_{\text{упр}} = 7\pi/3p^2$, см. 13.4.

2) Появление дополнительной малости $\sim 1/(pa_B)^2$ в амплитуде (и $\sim 1/(pa_B)^4$ в сечении) рассматриваемого процесса по сравнению со случаем упругого рассеяния (без переворота спина) имеет простое объяснение. Действительно, чтобы «поменяться» местами, электроны должны рассеяться друг на друге под углом $\approx 180^\circ$ в с.ц.и. Зависимость амплитуды резерфордского рассеяния от переданного импульса, $f \sim \tilde{U}(q) \sim 1/(qa_B)^2$, как раз и приводит к такой малости; при этом $q \approx p$ (в случае упругого рассеяния уже $qa_B \sim 1$, значение $q_{\text{min}} \sim 1/a_B$ при этом определяется экранировкой кулоновского потенциала в атоме на расстояниях $\sim a_B$).

3) Существенным является то обстоятельство, что в рассматриваемом процессе большое изменение импульса имеют именно две частицы (два электрона) и оно может быть обеспечено уже при их однократном взаимодействии. В других реакциях с перераспределением частиц вида $a + (bc) \rightarrow b + (ac)$ в случае $m_a \neq m_b$ уже $p_a \neq p_b$ и большое изменение импульса частиц a и b требует также большой передачи импульса и частице c . Это приводит к появлению дополнительной малости амплитуды процесса⁴⁵⁾ $\sim \tilde{U}(q)/q^2$. Такая ситуация возникает и в рассматриваемом процессе (1) при не слишком малых углах рассеяния, когда $q \gg 1$, как это видно из формулы (5). Такая дополнительная малость связана с тем, что амплитуда процесса включает в.ф. атома водорода (составной системы в общем случае) $\phi(p)$, имеющую при больших импульсах ($p \sim q \gg 1$) асимптотику вида $\phi(p) \sim \tilde{U}(p)/p^2 \sim 1/p^4$ (для s -состояний, сравнить с 4.17 и 4.18). Отмеченная малость имеет такой же порядок величины, как и в членах второго приближения по взаимодействию

⁴⁵⁾ Сравнить с 13.79.

в T -операторе. В этом случае (когда велико изменение импульса всех частиц) расчеты амплитуды и сечения процесса на основе первого приближения теории возмущений даже при больших энергиях носят лишь качественный характер. Последовательный расчет асимптотики амплитуды требует учета в T -операторе членов более высокого порядка по взаимодействию (для процессов с большим изменением импульса всех частиц в трехчастичной системе, как, например, в условиях задачи 13.79, следует учитывать члены второго порядка по взаимодействию $V_{\alpha, \beta}$).

13.79. Приближение Оппенгеймера — Бринкмана — Крамерса для процесса перезарядки $e_+ + (e_- p) \rightarrow (e_+ e_-) + p$ основано на использовании для T -оператора выражения ⁴⁶⁾

$$\hat{T} \approx V_{\alpha} \approx U_{e^+e^-} = - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

где $\mathbf{r}_{1,2}$ — радиусы-векторы позитрона (электрона). Обозначим через \mathbf{p}_1 импульс налетающего позитрона (в системе покоя атома водорода, $m_p = \infty$), а \mathbf{p}_2 — импульс образующегося позитрония (его масса $m(e^+e^-) = 2$). Из закона сохранения энергии следует, что $p_2 = \sqrt{2} p_1$ ($E = p_1^2/2 = p_2^2/4$, энергией связи в атоме водорода и в позитронии можно пренебречь, так как $p_{1,2} \gg 1$).

Волновые функции начального (канал α) и конечного (канал β) состояний имеют вид

$$\Psi_{\alpha} = e^{i\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1} \psi_{1s}(r_2),$$

$$\Psi_{\beta} = \exp \left[\frac{i}{2} \mathbf{p}_2 (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{8}} \psi_{nlm} \left(\frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{2} \right).$$

Здесь $\psi_{nlm}(r)$ — в. ф. атома водорода (с массой $m = 1$!), коэффициент $1/\sqrt{8}$ и множитель $1/2$ в аргументе в. ф. соответствует тому, что радиус Бора для позитрония в 2 раза больше, чем у атома водорода.

Амплитуда процесса в ОБК-приближении описывается выражением (сделана подстановка $\rho = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/2$)

$$T_{\text{ОБК}}(1s \rightarrow nlm) = \langle \beta | U_{e^+e^-} | \alpha \rangle =$$

$$= -\sqrt{2} \int \psi_{1s}(r) e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \mathbf{r}} dV \int \frac{1}{\rho} \psi_{nlm}^*(\rho) e^{-i(\mathbf{p}_2 - 2\mathbf{p}_1) \rho} d^3\rho. \quad (1)$$

⁴⁶⁾ Те же результаты следуют и из выбора $T \approx V_{\beta} \approx U_{e^-p}$; см. предыдущую задачу, где сделан ряд общих замечаний о процессах с перераспределением частиц. Отметим, что для процессов перезарядки результаты как точного вычисления амплитуды в первом порядке теории возмущений согласно $T = V_{\alpha, \beta}$, так и в ОБК-приближении носят лишь качественный характер (последовательный расчет асимптотики амплитуды требует учета членов второго приближения).

Первый интеграл здесь равен $(2\pi)^{3/2}\varphi_{1s}(q)$ с $q = p_2 - p_1$, а второй, с учетом у. Ш., есть

$$(2\pi)^{3/2} \left(\frac{1}{2} q_1^2 - E_n \right) \varphi_{nlm}^*(q_1), \quad \text{где} \quad q_1 = 2p_1 - p_2.$$

Так как $q, q_1 \gg 1$, то воспользовавшись для волновых функций $\varphi(p)$ в кулоновском потенциале $U = -1/r$ (при этом $\mathcal{O}(p) = -1/2\pi^2 p^2$) их асимптотикой при $p \rightarrow \infty$ согласно 4.18:

$$\varphi_{1s}(p) = \frac{\sqrt{8}}{\pi p^4}, \quad \varphi_{nlm}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2(l!)}{p^{l+4}} (-2i)^l \tilde{R}_{nl}(0) Y_{lm}(n) \quad (2)$$

(здесь учтено соотношение для координатных кулоновских волновых функций

$$\psi_{nlm}(r) = Y_{lm}(n) r^l \tilde{R}_{nl}(r),$$

$$\tilde{R}_{nl}(0) = \frac{2^{l+1}}{(2l+1)! n^{2+l}} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}},$$

см. [1, § 36]), получаем

$$T_{\text{ОБК}}(1s \rightarrow nlm) = - \frac{16 \sqrt{2\pi^3} (\sqrt{2} i)^l \tilde{R}_{nl}(0) l! Y_{lm}(n_0)}{(3 - 2\sqrt{2} \cos \theta)^{3+l/2} p_1^{6+l}}. \quad (3)$$

Здесь $n_0 = \frac{-p_2 + 2p_1}{|p_2 - 2p_1|}$, а также учтено, что $q_1^2 = 2q^2 = 2(3 - 2\sqrt{2} \cos \theta) p_1^2$, где θ — угол между векторами p_2 и p_1 .

Как видно, в ОБК-приближении угловое распределение образующегося позитрония⁴⁷⁾, $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{\sqrt{2} \pi^2} |T|^2$, не зависит от величины импульса налетающего позитрона, резко анизотропно (значения $3 - 2\sqrt{2} \cos \theta$ для углов $\theta = 0$ и π различаются в ≈ 35 раз), а поляризационное состояние образующегося позитрония характеризуется тем, что проекция его орбитального момента на направление вектора n_0 (лежащего в плоскости реакции) имеет определенное, равное нулю, $m_n = 0$, значение, так как $Y_{lm}(\theta = 0) = \sqrt{(2l+1)/4\pi} \delta_{m,0}$. Для полного сечения перезарядки, просуммированного по значениям проекции орбитального момента m образующегося позитрония, получаем

$$\sigma_{\text{ОБК}}(1s \rightarrow nl) = 64\pi a_B^2 \frac{2^l (2l+1) (l!)^2 \tilde{R}_{nl}^2(0)}{(l+5) (3 - 2\sqrt{2})^{5+l}} \frac{1}{V^{12+2l}}, \quad (4)$$

⁴⁷⁾ См. 13.78 о нормировке амплитуд; в данной задаче $\mu_1 = 1$, $\mu_2 = 2$, $p_2 \approx \sqrt{2} p_1$.

где $V = p_1 a_B / \hbar$ — относительная скорость сталкивающихся позитрона и атома водорода в атомных единицах. Отсюда, в частности, сечение перезарядки в ns -состояния позитрония можно записать в виде

$$\sigma_{\text{ОБК}}(1s \rightarrow ns) = \frac{\pi a_B^2}{n^3} \left(\frac{2,89}{V} \right)^{12}. \quad (5)$$

Обратим внимание на резкую энергетическую зависимость сечения перезарядки, $\sigma \propto 1/p^{12+2l}$ (сравнить с результатом предыдущей задачи и со случаем упругого рассеяния, см. 13.4). Она объясняется тем, что все частицы, участвующие в процессе, имеют большое изменение импульса. В связи с этим отметим, что подобную энергетическую зависимость имеют и сечения перезарядки при столкновении быстрых тяжелых $m \gg m_e$ частиц с атомом водорода. При $m \gg m_e$ сечение перезарядки не зависит от массы налетающей частицы (например, протона, мюона и т. д.). В частности, в этом случае сечение перезарядки в ns -состояние

$$\sigma_{\text{ОБК}}(1s \rightarrow ns) = \pi a_B^2 \frac{2^{18} Z^5}{5n^3 V^{12}} \approx \frac{\pi a_B^2}{n^3} Z^5 \left(\frac{2,47}{V} \right)^{12} \quad (6)$$

(Z — заряд частицы). Из сравнения (5) и (6) видно, что сечение перезарядки при столкновении позитрона с атомом водорода в ≈ 7 раз больше, чем при столкновении протона (при одинаковых скоростях).

13.80. Обозначим через $\mathbf{R}_{A(B)}$ радиусы-векторы центров масс частиц $A(B)$, $m_{A(B)}$ и $\mathbf{p}_{1,2}$ — их массы и импульсы относительного движения до (1) и после (2) столкновения. Волновые функции начального и конечного состояний системы имеют вид ⁴⁸⁾

$$\Psi_i = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \mathbf{R}\right) \Psi_{Ai} \{ \mathbf{x}'_a \} \Psi_{Bi} \{ \mathbf{r}'_B \}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B, \quad (1)$$

$$\Psi_f = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_2 \mathbf{R}\right) \Psi_{Af} \{ \mathbf{x}'_a \} \Psi_{Bf} \{ \mathbf{r}'_B \}, \quad \hbar \mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1.$$

Амплитуда рассматриваемого процесса в борновском приближении описывается выражением (сравнить с 13.77 и 13.78):

$$T_{if} = -\frac{\mu}{2\pi \hbar^3} f = \langle \Psi_f | \sum_{a,b} \frac{e_a e_b}{|\mathbf{x}_a - \mathbf{r}_b|} | \Psi_i \rangle, \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2, \quad (2)$$

где $\mu = m_A m_B / (m_A + m_B)$ — приведенная масса частиц A и B . Интегрирование в матричном элементе (2) проводится как по

⁴⁸⁾ Волновые функции $\Psi_{A(B)}$ составных частиц описывают состояния входящих в них частиц относительно центра масс соответствующей системы (в случае атомов — совпадающего с положением ядер).

независимым «внутренним» координатам $\mathbf{x}'_a, \mathbf{r}'_b$ (в случае атома — это координаты всех электронов), так и по радиусу-вектору \mathbf{R} относительного движения частиц. Записав в нем $\mathbf{x}_a = \mathbf{R}_A + \mathbf{x}'_a$ и $\mathbf{r}_b = \mathbf{R}_B + \mathbf{r}'_b$, воспользовавшись известным разложением в интеграл Фурье кулоновского потенциала

$$\frac{1}{|\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \exp\{i\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b)\} \frac{d^3\boldsymbol{\kappa}}{\boldsymbol{\kappa}^2}$$

и учтя вид волновых функций (1), получаем

$$T_{if} = \frac{4\pi e^2}{q^2} F_{if}^A(-\mathbf{q}) F_{if}^B(\mathbf{q}). \quad (3)$$

Здесь

$$eF_{if}^{A(B)}(\mathbf{q}) = \langle \Psi_{A(B)f} | \sum_a e_a \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}'_a) | \Psi_{A(B)i} \rangle \quad (4)$$

— электрические формфакторы для соответствующих переходов в составных частицах А(В). Такой амплитуде (3) можно сопоставить график — *диаграмму Фейнмана*, приведенный на рис. 52. Он наглядно передает важное свойство амплитуды — ее *факторизованный* вид по отношению к участвующим в процессе частицам А и В. На этом рисунке волнистой линии между вершинами сопоставляется множитель, равный $4\pi/q^2$, а самим *вершинам* — формфакторы $eF_{if}^{A(B)}(\mp \mathbf{q})$ (заметим, что изменения импульсов частиц А и В в процессе столкновения отличаются знаком).

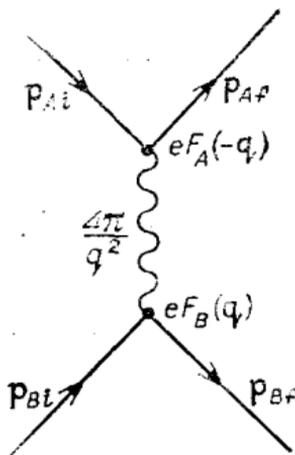


Рис. 52

Отметим ряд свойств формфакторов.

1) Для точечных (бесструктурных) частиц $F(\mathbf{q}) = Z = \text{const}$, где Ze — заряд частицы.

2) При $q \rightarrow 0$, разлагая $\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})$ в выражении (4) для $F(\mathbf{q})$ в ряд, замечаем, что отличен от нуля и равен при этом $F_{nn}(0) = Z$ лишь *упругий* (без изменения состояния составной частицы) формфактор, причем для системы с отличным от нуля зарядом Ze . Во всех остальных случаях $F_{if}(0) = 0$ (для заряженной частицы — как следствие ортогональности волновых функций). Характер «зануления» формфактора при $q \rightarrow 0$ зависит от квантовых чисел — момента и четности — начального и конечного состояний. Наиболее медленно, $eF_{if} \approx -i\langle f | \hat{\mathbf{d}} | i \rangle \mathbf{q} \propto q$ убывает формфактор для дипольных (или $E1$ —) переходов. Для переходов с одинаковыми значениями момента и четности (например, для S -состояний) уже $F_{if} \propto q^2$. По мере увеличения

разности значений моментов начального и конечного состояний обращение формфактора в нуль при $q \rightarrow 0$ происходит все более резко.

3) При $q \rightarrow \infty$ формфактор любой составной системы обращается в нуль⁴⁹⁾. Закон убывания формфактора при этом уже существенно зависит от числа частиц в системе и от характера убывания фурье-компоненты потенциала взаимодействия. Из физических соображений представляется очевидным, что чем быстрее убывает $U(q)$ и чем больше частиц в составной системе, тем быстрее убывает и формфактор, сравнить с 13.84.

Для рассматриваемых переходов атома водорода формфакторы

$$F_{1s \rightarrow nlm}(q) = \int \Psi_{nlm}^*(r) (1 - e^{-iqr}) \Psi_{1s}(r) dV$$

легко вычислить, учтя вид волновых функций — см. (IV.4), если воспользоваться сферическими координатами с полярной осью, направленной вдоль вектора q :

$$F_{1s \rightarrow 1s} = 1 - F_{ат}(q) = \frac{8q^2 + q^4}{(4 + q^2)^2}, \quad F_{1s \rightarrow 2s} = -\frac{4\sqrt{2}q^2}{\left(\frac{9}{4} + q^2\right)^3}. \quad (5)$$

В случае $2p$ -состояний удобно записать угловую часть волновой функции в виде $\sqrt{3/4\pi}(\epsilon(m) \mathbf{n})$, где $|\epsilon(m)|^2 = 1$ (сравнить с 3.41 и 3.42), после чего получаем

$$\begin{aligned} F_{1s \rightarrow 2pm} &= -\frac{\epsilon^*(m)}{4\sqrt{2}\pi} i \frac{\partial}{\partial q} \int \exp\left(-\frac{3r}{2} - iqr\right) dV = \\ &= 6\sqrt{2}i \frac{\epsilon^*(m)q}{\left(\frac{9}{4} + q^2\right)^3} \quad (6) \end{aligned}$$

(формфактор отличен от нуля лишь для состояний с проекцией орбитального момента электрона на направлении вектора q равной нулю).

Переходя к вычислению сечений столкновения, заметим, что

$$\begin{aligned} q^2 &= p_1^2 + p_2^2 - 2p_1 p_2 \cos \theta, \quad p_2 = \sqrt{p_1^2 - 2\mu(\epsilon_1 - \epsilon_2)} \approx \\ &\approx p_1 - \frac{\mu(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{p_1}, \end{aligned}$$

где $\epsilon_{1,2} > 0$ — энергии связи рассматриваемых систем до и после столкновения. Соответственно, $d\Omega$ можно заменить на $\pi dq^2/p_1^2$

⁴⁹⁾ Для атомов в приближении бесконечной массы ядра при $q \rightarrow \infty$ упругий формфактор $F_{упр} = Z$ (он определяется вкладом неподвижного ядра).

и интегрировать по q^2 в пределах от 0 до ∞ (ввиду быстрой сходимости на верхнем пределе, $q_{\max}^2 \approx 4p_1^2$). Заменять нижний предел интегрирования

$$q_{\min}^2 = (p_1 - p_2)^2 \approx \left(\frac{\mu (\epsilon_1 - \epsilon_2)}{p_1} \right)^2$$

на 0 нельзя, ввиду возникающей расходимости, лишь для таких неупругих столкновений, в которых одна из сталкивающихся частиц имеет отличный от нуля заряд и ее состояние в процессе столкновения не изменяется, так что для нее $F(0) = Z \neq 0$, а для другой частицы рассматриваемый переход является дипольным, так что $eF_{ij} \approx -id_{ij}q$ при $q \rightarrow 0$.

Элементарное интегрирование приводит к следующим результатам:

$$1) \quad \sigma(1s1s \rightarrow 1s1s) = \frac{4\pi}{V^2} \int_0^\infty F_{1s \rightarrow 1s}^4(q) dq^2 = \frac{33\pi}{35V^2}, \quad (7)$$

$$2) \quad \sigma(1s \rightarrow 2s) = \frac{4\pi Z^2}{V^2} \int_0^\infty F_{1s \rightarrow 2s}^2(q) dq^2 = \frac{2^{17}\pi Z^2}{5 \cdot 3^{10}V^2} \approx 0,444 \frac{\pi Z^2}{V^2}, \quad (8)$$

где $V = p_1/\mu$ — относительная скорость сталкивающихся частиц, Ze — заряд частицы, сталкивающейся с атомом водорода.

Для столкновений с переходом $1s \rightarrow 2p$ для атома водорода полное сечение, просуммированное по проекциям момента m (при этом $\sum_m |\epsilon(m)q|^2 = q^2$), удобно вычислять, записав его в виде ($x = q^2$, $a = 9/4$)

$$\begin{aligned} \sigma(1s \rightarrow 2p) &= 288\pi \left(\frac{Z}{V} \right)^2 \left(-\frac{1}{5!} \frac{\partial^5}{\partial a^5} \int_{q_{\min}^2}^\infty \frac{dx}{x(a+x)} \right) = \\ &= 288\pi \left(\frac{Z}{V} \right)^2 \frac{1}{5!} \left[-\frac{\partial^5}{\partial a^5} \left(\frac{1}{a} \ln \frac{a}{q_{\min}^2} \right) \right] = \\ &= \frac{2^{17}\pi Z^2}{3^{10}V^2} \left[\ln(16V^2) - \frac{137}{60} \right], \quad (9) \end{aligned}$$

здесь $q_{\min}^2 = (\epsilon_{2p} - \epsilon_{1s})^2/V^2 = 9/64 V^2$. Сумма (8) и (9) дает

$$\begin{aligned} \sigma(1s \rightarrow n=2) &= \frac{2^{18}\pi Z^2}{3^{10}V^2} \left(\ln 4V - \frac{25}{24} \right) \approx \\ &\approx 4,44 \frac{\pi Z^2}{V^2} \left(\ln 4V - \frac{25}{24} \right) \quad (10) \end{aligned}$$

— полное сечение возбуждения состояний атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ заряженной частицей.

13.81. Как и в предыдущей задаче, сечение столкновения может быть связано с электрическим формфактором молекулы

$$eF_{0 \rightarrow \nu KM}(\mathbf{q}) = \langle n, \Lambda = 0, \nu KM | \sum_a e_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a} | n, 0 \rangle; \quad (1)$$

для начального состояния квантовые числа $\Lambda = \nu = K = M = 0$, а n характеризует электронное состояние молекулы. Волновые функции состояний молекулы с $\Lambda = 0$, входящие в матричный элемент (1), имеют вид

$$\Psi_{n\Lambda=0\nu KM} = \Psi_{n\Lambda=0}^{\text{эл}}(\xi_a, \mathbf{R}) \Psi_{\nu}^{\text{кол}}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) Y_{KM}(\mathbf{n}). \quad (2)$$

Здесь ξ_a — электронные переменные (координатные и спиновые); $\mathbf{R} = R\mathbf{n} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ — радиус-вектор относительного положения ядер, их массы — $M_{1,2}$, а радиусы-векторы в с.ц.и. молекулы: $\mathbf{R}_1 = M_2\mathbf{R}/(M_1 + M_2)$ и $\mathbf{R}_2 = -M_1\mathbf{R}/(M_1 + M_2)$. Суммирование в (1) ведется как по электронам молекулы (\mathbf{r}_a — их радиусы-векторы относительно центра масс молекулы), так и по ядрам, вклад которых есть $Z_1 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_1} + Z_2 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_2}$.

Переходя к оценке сечений столкновения заряженной частицы с молекулой

$$\frac{d\sigma_{0 \rightarrow \nu KM}}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 q^2} \right)^2 |F_{0 \rightarrow \nu KM}(\mathbf{q})|^2, \quad (3)$$

где Ze — заряд частицы, μ — приведенная масса ее и молекулы, заметим, что особенно наглядно они могут быть получены, если пренебречь изменением состояний валентных электронов атомов при образовании молекулы. В этом приближении волновая функция электронного терма молекулы

$$\Psi_{n\Lambda=0}^{\text{эл}} \approx \Psi_1(\mathbf{r}_a - \mathbf{R}_1) \Psi_2(\mathbf{r}_b - \mathbf{R}_2),$$

где $\Psi_{1,2}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ — в.ф. атомов, входящих в молекулу, и для формфактора ее получаем

$$F_{0 \rightarrow \nu KM} \approx \langle \nu KM | e^{-i\mathbf{R}_1\mathbf{q}\mathbf{n}} F_1(q) + e^{i\mathbf{R}_2\mathbf{q}\mathbf{n}} F_2(q) | 0 \rangle, \quad (4)$$

где $F_{1,2}(q)$ — формфакторы атомов, входящих в молекулу (включающие и вклады соответствующих ядер). Заметим, что при $q = 0$ формфактор молекулы, как и любой незаряженной системы, равен нулю (см. обсуждение свойств формфакторов в предыдущей задаче).

Если ввиду малости амплитуды колебаний ядер заменить $\mathbf{R}_{1,2}$ их значениями в положении равновесия, то из-за ортогональности колебательных в.ф. отличными от нуля окажутся

Формфакторы лишь для переходов с $v = 0$ (т. е. без изменения колебательного состояния молекулы). Для таких переходов дифференциальное сечение (3), просуммированное по значениям квантовых чисел K, M конечных состояний молекулы, в приближении (4) с учетом условия полноты системы шаровых функций, согласно которому

$$\sum_{KM} |\langle KM | \hat{A} | 0 \rangle|^2 = \sum_{KM} \langle 0 | \hat{A}^+ | KM \rangle \langle KM | \hat{A} | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{A}^+ \hat{A} | 0 \rangle,$$

принимает вид

$$\sum_{KM} \frac{d\sigma_{0 \rightarrow 0 KM}}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu Z e^2}{\hbar^2 q^2} \right)^2 \langle 0 | |F_1(q) + F_2(q) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_c}|^2 | 0 \rangle,$$

сравнить с 13.7.

Сечения столкновений без возбуждения колебаний молекулы имеют те же закономерности, как и в случае столкновений заряженной частицы с атомами (сравнить с предыдущей задачей). В частности, для столкновений с возбуждением вращательного уровня молекулы с моментом $K \neq 1$ сечение процесса

$$\sigma_{0 \rightarrow 0 KM} = \pi a_B^2 Z^2 A_{KM} \left(\frac{V_{at}}{V} \right)^2, \quad K \neq 1, \quad (5)$$

где V — относительная скорость сталкивающихся частиц и $A_{KM} \sim 1$ для наиболее существенных переходов.

Для столкновений с возбуждением вращательного уровня с $K = 1$, связанного с основным уровнем дипольным переходом⁵⁰), при $q \rightarrow 0$ имеем (сравнить с предыдущей задачей):

$$\frac{d\sigma(0 \rightarrow 01M)}{dq^2} = \frac{4\pi Z^2 e^2 d_0^2}{3\hbar^2 q^4 V^2} |\boldsymbol{\varepsilon}(M) \mathbf{q}|^2. \quad (6)$$

Здесь $\boldsymbol{\varepsilon}(M)$ — вектор поляризации, определяющий вращательное состояние молекулы с $K = 1$ и связанный с шаровой функцией соотношением $Y_{1M} = \sqrt{3/4\pi} \boldsymbol{\varepsilon}(M) \mathbf{n}$, при этом $|\boldsymbol{\varepsilon}|^2 = 1$. Формула (6) следует из выражений (1) и (3), если учесть, что: 1) при $q \rightarrow 0$ сумма в (1) принимает вид $-i\mathbf{q}\mathbf{d}$, где \mathbf{d} — оператор дипольного момента молекулы, 2) усреднение \mathbf{d} по электронному состоянию молекулы с $\Lambda = 0$ дает $d(R)\mathbf{n}$ и 3) при последующем усреднении по колебательному состоянию с $v = 0$ можно заменить $d(R)$ на $d(R_0) \equiv d_0$ ввиду малости амплитуды колебаний ядер (сравнить с 11.25). Суммирование в выражении (6) по M

⁵⁰) Для этого перехода приближение (4) при $q \rightarrow 0$ не оправдано: дипольный момент молекулы определяется как раз валентными электронами.

дает $\sum |\varepsilon(M) q|^2 = q^2$; последующее интегрирование по q^2 с учетом расходимости интеграла на нижнем пределе (при $q^2 \rightarrow 0$) и значения

$$q_{\min}^2 = [\hbar/\tilde{\mu} R_0^2 V]^2$$

позволяет получить сечение перехода в состояния молекулы с $K = 1$ с логарифмической точностью ⁵¹⁾

$$\sigma(0 \rightarrow v=0, K=1) \approx \frac{8\pi Z^2 e^2 d_0^2}{3\hbar^2 V^2} \ln \frac{\tilde{\mu} V}{m_e V_{\text{ат}}}. \quad (7)$$

Рассмотрим закономерности для процессов столкновения, сопровождающихся возбуждением колебательных уровней молекулы. Как отмечалось выше, замена R на равновесное значение R_0 ввиду малости амплитуды колебаний ядер правомерна лишь для переходов без возбуждения колебаний: для состояний с $v \neq 0$ в этом приближении формфактор обращается в нуль из-за ортогональности в.ф. Соответственно для переходов с $v \neq 0$ в рассматриваемых выражениях необходимо выполнить разложение по малому параметру $\Delta R/R_0$, где $\Delta R = R - R_0$ — порядка амплитуды колебаний ядер. Для линейного члена разложения, отвечающего за переходы с $\Delta v = 1$, в выражении (1) при $v = 1$, по сравнению со случаем $v = 0$, появляется малый множитель, по порядку величины равный (см. (II.3) и 11.25)

$$\langle v=1 | \frac{R - R_0}{R_0} | v=0 \rangle = \frac{a_{\text{кол}}}{\sqrt{2} R_0} \sim \left(\frac{m_e}{\tilde{\mu}} \right)^{1/4},$$

где $\tilde{\mu}$ — приведенная масса ядер молекулы. Это приводит к существенно меньшим, в $\sim (\tilde{\mu}/m_e)^{1/2}$ раз, значениям сечений переходов с $v = 1$. По мере увеличения значения v необходимо брать все более высокие степени разложения по $\Delta R/R_0$, что приводит к более резкому, в $(\mu/m_e)^{v/2}$ раз, подавлению сечений для соответствующих переходов молекулы.

13.82. Для столкновений заряженной частицы с атомом, сопровождающихся дипольным переходом атома, доминирующую роль играет область малых значений q^2 . При этом сечение столкновения с переходом из s - в p -состояние атома с логарифмиче-

⁵¹⁾ При этом, как обычно, для верхнего предела интегрирования выбрано значение $q_{\max}^2 \sim a_B^{-2}$. Заметим, что хотя аргумент логарифма в выражении (7) существенно больше, чем в случае дипольного перехода в атоме из-за малости энергии вращения, тем не менее точность формулы (7) от этого не возрастает. Дело в том, что обычно дипольный момент молекулы d_0 заметно меньше характерной величины ea_B .

ской точностью описывается выражением (сравните с 13.80)

$$\sigma_{s \rightarrow p} = \frac{4\pi Z^2 e^2}{\hbar^2 V^2} |\langle l=1, m=0 | d_z | 0 \rangle|^2 \ln \frac{1}{q_{\min}^2 a_B^2}, \quad (1)$$

где Ze — заряд налетающей частицы, V — относительная скорость сталкивающихся частиц. Для перехода $2s \rightarrow 2p$ в атоме водорода матричный элемент⁵²⁾ $\langle 1, 0 | d_z | 0 \rangle = 3ea_B$ был вычислен в 11.33 в связи с эффектом Штарка для состояний с $n=2$.

В пренебрежении релятивистскими поправками состояния $2s$ и $2p$ атома водорода вырождены по энергии, при этом $q_{\min}^2 = 0$ и сечение (1) расходится. Расщепления Δ уровней $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$, определяющие значения $q_{\min}^2 = (\Delta/\hbar V)^2$, обсуждались в 11.62. Поскольку теперь переходы в состояния атома $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ следует рассматривать отдельно, необходимо учесть, что для них в формулу (1) нужно ввести дополнительные множители равные $1/3$ и $2/3$ соответственно для $p_{1/2}$ - и $p_{3/2}$ -состояний. Эти множители — квадраты соответствующих коэффициентов Клебша — Гордана (см., например, 5.18) — отражают вклад p -состояния с $l_z = 0$ в состояния⁵³⁾ $p_{1/2}$ и $p_{3/2}$. С учетом отмеченных обстоятельств получаем

$$\sigma(2s \rightarrow 2p) = 72\pi a_B^2 \left(\frac{Ze^2}{\hbar V} \right)^2 \ln \frac{\hbar V}{a_B \Delta_0^{1/3} \Delta_1^{2/3}}, \quad (2)$$

здесь $\Delta_0 = E(2s_{1/2}) - E(2p_{1/2})$ и $\Delta_1 = E(2p_{3/2}) - E(2s_{1/2})$; числовое значение $\Delta_0^{1/3} \Delta_1^{2/3} \approx 8 \cdot 10^{-7}$ (в атомных единицах).

Как видно из выражения (2), сечение процесса $\sigma \gg \left(\frac{V_{ар}}{V} \right)^2 \sigma_0$,

где $\sigma_0 = \overline{\pi r^2} = 40\pi a_B^2$ характеризует поперечный размер атома водорода в состояниях⁵⁴⁾ с $n=2$. Это означает, что в задаче существенны большие прицельные параметры ($\gg a_B$). Эффективное взаимодействие на таких расстояниях $Zedr/r^3 \sim Zed/r^2$. Условие применимости к такому потенциалу теории возмущений, см. (XIII.7), начинает выполняться на расстояниях $r \gg Zed/\hbar V$.

⁵²⁾ Подчеркнем, что выражение (1) описывает сечение, просуммированное по проекциям момента p -состояния. Хотя в (1) фигурирует состояние с $l_z = 0$, следует, однако, иметь в виду, что выбор оси квантования z — вдоль вектора q — зависит от угла рассеяния.

⁵³⁾ При учете релятивистских поправок l_z уже не является интегралом движения.

⁵⁴⁾ Для ns -состояний атома водорода $\overline{r^2} = \frac{1}{2} n^2 (5n^2 + 1)$

Даже для значений $V \approx 1$ эти расстояния не превосходят отмеченные выше, что указывает на применимость формулы (2) и для таких скоростей столкновения.

Заметим в заключение, что большая величина сечения перехода (2) означает, что время жизни метастабильного $2s$ -состояния в газе может существенно уменьшиться за счет столкновений (для изолированного атома водорода $\tau(2s) = 1/8$ с, при переходе в $2p$ -состояние атом «высвечивает» за время $\sim 10^{-9}$ с).

13.83. Дифференциальное сечение расщепления дейтрона с переходом протон-нейтронной системы в состояние непрерывного спектра с импульсом относительного движения $p = \hbar k$ в с. ц. и. пары в случае точечного ядра описывается выражением

$$d\sigma_{\text{расщ}} = \frac{4Z^2 e^4 m_d^2}{\hbar^4 q^4} |\langle p, - | e^{-iqr_p} | 0 \rangle|^2 d^3k d\Omega_f. \quad (1)$$

Здесь $\hbar q = P_f - P_i$, $P_i = m_d V$ — импульс дейтрона, P_f — суммарный импульс нуклонов после столкновения, $d\Omega_f$ — элемент телесного угла, заключающий направление вектора P_f , m и $m_d = 2m$ — массы нуклона и дейтрона. Матричный элемент

$$F_{0 \rightarrow p} = \langle p, - | \exp(-iqr_p) | 0 \rangle$$

можно рассматривать как неупругий формфактор для переходов в состояния непрерывного спектра, сравнить с 13.80. Волновая функция начального состояния в нем является в. ф. дейтрона в приближении потенциала нулевого радиуса действия (см. 4.10 и 12.1)

$$\Psi_0(r) = \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}} \frac{1}{r} e^{-\kappa r}, \quad \epsilon_0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{m}$$

(ϵ_0 — энергия связи дейтрона), причем $r_p = r/2$. В качестве волновых функций конечных состояний следует выбрать⁵⁵⁾ в. ф. $\Psi_k^-(r)$, имеющие асимптотику «плоская + сходящаяся» волны, см. по этому поводу [1, § 136]; они нормированы на $\delta(k - k')$.

Доминирующий вклад в сечение расщепления вносит область малых значений q^2 , при этом существенны переходы в состояния двухнуклонной системы, связанные с дейтроном дипольным переходом, так как для них $d\sigma \propto dq^2/q^2$ (сравнить с 13.80). Для таких q имеем

$$\langle p, - | \exp(-iqr_p) | 0 \rangle \approx \langle p, - | (-iqr_p) | 0 \rangle, \quad (2)$$

причем в последнем выражении уже можно заменить в. ф. Ψ_k^- на плоскую волну $\Psi_k = (2\pi)^{-3/2} e^{ikr}$. Это связано с тем, что в по-

⁵⁵⁾ Другой удобный выбор волновых функций конечных состояний см. в 11.63.

тенциале нулевого радиуса в. ф. $\Psi_{\mathbf{k}}^-$ и $\Psi_{\mathbf{k}}$ отличаются лишь s -волнами, не дающими вклада в матричный элемент дипольного момента (2) (до разложения экспоненты заменять $\Psi_{\mathbf{k}}^-$ на $\Psi_{\mathbf{k}}$ нельзя из-за неортогональности в. ф. $\Psi_{\mathbf{k}}$ и Ψ_0). Вычисление матричного элемента дипольного момента дает

$$\begin{aligned} \langle p, - | (-iqr_p | 0) &= \frac{\sqrt{\kappa} q}{8\pi^2} \frac{\partial}{\partial k} \int \frac{1}{r} e^{-\kappa r - i\mathbf{k}r} d^3r = \\ &= \frac{\sqrt{\kappa} q}{2\pi} \frac{\partial}{\partial k} \frac{1}{k^2 + \kappa^2} = - \frac{\sqrt{\kappa} qk}{\pi (k^2 + \kappa^2)^2} \end{aligned} \quad (3)$$

(здесь угловая зависимость $\infty(\mathbf{qk})$ от вектора \mathbf{k} отражает то обстоятельство, что для дипольного перехода момент нуклонной пары в конечном состоянии $l = 1$).

Подставив (3) в выражение (1), выполним интегрирование по направлениям вектора \mathbf{k} , воспользовавшись соотношениями

$$d^3k = k^2 dk d\Omega, \quad \int (\mathbf{qk})^2 d\Omega = \frac{4\pi}{3} q^2 k^2.$$

После этого $d\Omega_f$ в (1) можно заменить на $\pi \hbar^2 dq^2 / P_i^2$. Далее, значение P_f , следующее из закона сохранения энергии

$$\frac{1}{2m_d} P_i^2 - \epsilon_0 = \frac{1}{2m_d} P_f^2 + \epsilon,$$

где $\epsilon = \hbar^2 k^2 / m$ — энергия относительного движения нуклонной пары после столкновения, определяет

$$\hbar^2 q_{\min}^2 = (P_f - P_i)^2 \approx \frac{1}{V^2} (\epsilon + \epsilon_0)^2.$$

Интегрируя теперь по q^2 в пределах от q_{\min}^2 до $^{56)} q_{\max}^2 \approx \kappa^2$, находим

$$d\sigma_{\text{расщ}} = \frac{8(Ze^2)^2 (\epsilon_0 e^3)^{1/2}}{3m (\epsilon + \epsilon_0)^4 V^2} \ln \frac{\hbar^2 \kappa^2 V^2}{(\epsilon + \epsilon_0)^2} d\epsilon. \quad (4)$$

Как видно, характерные значения $\epsilon \sim \epsilon_0$. Интегрирование выражения (4) по ϵ дает полное сечение электрорасщепления дейтрона. При этом с логарифмической точностью можно пренебречь зависимостью от ϵ под логарифмом и получить (сделав

⁵⁶⁾ Заметим, что для больших значений q уже необходимо учитывать конечность размера ядра, формфактор которого быстро падает при $q > 1/R$. Так как в окончательный ответ q_{\max}^2 входит под логарифмом, его детальное значение не столь существенно.

подстановку $x = \sqrt{\epsilon}$, см. Д1.5)

$$\sigma_{\text{расщ}}(E) \approx \frac{\pi (Ze^2)^2}{6\epsilon_0 E} \ln \frac{E}{\epsilon_0}, \quad (5)$$

где $E = m_d V^2/2$ — энергия дейтрона.

Согласно (5) значение сечения для $E = 200$ МэВ, $\epsilon_0 = 2,2$ МэВ составляет $\sigma_{\text{расщ}} = 1,1 \cdot 10^{-28} Z^2$ см². Эта величина для всех ядер, кроме самых тяжелых, много меньше их геометрического размера, что указывает на доминирующую роль ядерного взаимодействия в процессе расщепления дейтрона при столкновении его с ядром.

Отметим наглядную квазиклассическую оценку сечения расщепления быстрого дейтрона с освобождением одного из нуклонов — протона или нейтрона — при столкновении с ядром радиуса R , считая последнее непрозрачным для падающих на него нуклонов:

$$\sigma \sim 2\pi R \Delta R, \quad \Delta R \sim R_d \sim 1/\kappa \quad (6)$$

(площадь кольца радиуса R и шириной порядка размера дейтрона).

В заключение подчеркнем, что освободившийся при расщеплении дейтрона нуклон уносит энергию $E_N \approx E/2$ и движется в направлении падающего пучка с углом разлета $\Delta\theta \sim (\epsilon_0/E)^{1/2}$ (поперечная составляющая импульса нуклона $p_{\perp} \sim \sqrt{m\epsilon_0}$ определяется энергией связи дейтрона).

13.84. Электрический формфактор для перехода между состояниями Ψ_1 и Ψ_2 двухчастичной составной системы описывается выражением (см., например, 13.80)

$$eF_{1 \rightarrow 2}(\mathbf{q}) = \langle n_2 l_2 l_{2z} | e_1 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} + e_2 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_2} | n_1 l_1 l_{1z} \rangle, \quad (1)$$

где $e_{1,2}$ и $m_{1,2}$ — заряды и массы частиц, $\mathbf{r}_{1,2}$ — их радиусы-векторы в с. ц. и., при этом

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

($\hbar\mathbf{q}$ — импульс, передаваемый системе).

Выражение (1) включает два интеграла

$$I(\mathbf{q}_{1,2}) = \int \Psi_{n_2 l_2 l_{2z}}^*(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q}_{1,2}\mathbf{r}) \Psi_{n_1 l_1 l_{1z}}(\mathbf{r}) d^3r, \quad (2)$$

здесь $\mathbf{q}_{1,2} = \pm m_{2,1} \mathbf{q} / (m_1 + m_2)$. Асимптотика этих интегралов при $q \rightarrow \infty$ определяется сингулярными слагаемыми радиальных волновых функций в $\Psi_{1,2}$, см. 4.18. Запишем

$$\Psi_{n l l_z}(\mathbf{r}) = e_{l \dots n}(l, l_z) x_l \dots x_n \{ \tilde{R}_{\text{рег}}(r) + \tilde{R}_{\text{синг}}(r) \},$$

где $\tilde{R}_{\text{рег}}(r)$ и $\tilde{R}_{\text{синг}}(r)$ — регулярная и сингулярная части радиальной функции. Напомним, что регулярная часть разлагается в ряд по четным $(r^2)^s$ — степеням переменной r , при этом $\tilde{R}_{\text{рег}}(0) \neq 0$, а для сингулярной части $\tilde{R}_{\text{синг}}(0) = 0$. Для получения асимптотики интеграла (2) в нем одну из радиальных функций надо взять при $r = 0$, а у другой — сохранить сингулярную часть, так что

$$I(\mathbf{q}) \underset{q \rightarrow \infty}{\approx} \mathbf{e}_{i \dots n}^* (2) \mathbf{e}_{s \dots t} (1) i \frac{\partial}{\partial q_i} \dots i \frac{\partial}{\partial q_n} i \frac{\partial}{\partial q_s} \dots i \frac{\partial}{\partial q_t} \times \\ \times \left\{ \tilde{R}_2(0) \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \tilde{R}_1 \text{ синг}(r) d^3r + \tilde{R}_1(0) \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \tilde{R}_2 \text{ синг}(r) d^3r \right\} \quad (3)$$

(сингулярная часть от обеих радиальных функций имеет более высокий порядок малости при $r \rightarrow 0$ и не влияет на асимптотически старший член разложения $I(\mathbf{q})$ при $q \rightarrow \infty$). Входящие сюда интегралы связаны с асимптотиками волновых функций в импульсном представлении. Согласно 4.18 имеем

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2\mu} \hat{D} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \tilde{R}_{\text{синг}}(r) d^3r \underset{q \rightarrow \infty}{\approx} -\tilde{R}(0) \hat{D} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(r) d^3r, \quad (4)$$

где дифференциальный оператор $\hat{D} = \mathbf{e}_{i \dots n}(l, l_z) \partial / \partial q_i \dots \partial / \partial q_n$, а μ — приведенная масса частиц.

Формулы (3), (4) определяют асимптотику интеграла (2), а с ним и асимптотику формфактора (1) при $q \rightarrow \infty$. В частности, для перехода между состояниями системы с орбитальными моментами $l_1 = 0$ и $l_2 = l$ находим

$$eF_{0 \rightarrow lm} \approx -8(2i)^l \pi^{5/2} \frac{\mu}{\hbar^2} \tilde{R}_1(0) \tilde{R}_2(0) Y_{lm}^* \left(\frac{\mathbf{q}}{q} \right) \times \\ \times \left\{ e_1 \left[q_1^l \frac{\partial^l}{\partial (q_1^2)^l} \frac{\tilde{U}(q_1)}{q_1^2} + q_1^{l-2} \frac{\partial^l}{\partial (q_1^2)^l} \tilde{U}(q_1) \right] + \right. \\ \left. + (-1)^l e_2 [q_1 \rightarrow q_2] \right\}, \quad (5)$$

где символ $[q_1 \rightarrow q_2]$ означает выражение вида, выписанного в первой квадратной скобке, в котором q_1 заменено на q_2 , а

$$\tilde{U}(q) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int U(r) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r.$$

Заметим, что закономерности убывания формфактора при $q \rightarrow \infty$ подобны отмеченным в 4.18 в связи с асимптотиками волновых функций в импульсном представлении. В частности,

для потенциалов со степенной асимптотикой $U \approx -\alpha/q^n$ с $n > 1$
формфактор

$$F_{1 \rightarrow 2} \propto q^{-(2+n+l_1+l_2)} \quad \text{при } q \rightarrow \infty. \quad (6)$$

Для иллюстрации полученного результата рассмотрим приложение формулы (5) к атому водорода. В приближении бесконечно тяжелого ядра формулу (5) надо несколько видоизменить, имея в виду, что при этом $q_2 \equiv 0$. Поэтому слагаемое $e_2 e^{-iq_2 r_2}$ в выражении (1), соответствующее вкладу протона, теперь сводится к его заряду e и для неупругих переходов не дает вклада в формфактор из-за ортогональности волновых функций. Имея в виду, что для кулоновского потенциала $U = -e^2/2\pi^2 q^2$, и используя для него значения радиальных функций в нуле (они приведены в 13.79), находим для переходов $1s \rightarrow ns$ и $1s \rightarrow np$ с $n \geq 2$

$$F_{1s \rightarrow ns} \approx -\frac{16}{n^{3/2} (qa_B)^4}; \quad F_{1s \rightarrow np} \approx \frac{16 \sqrt{3i} \sqrt{n^2 - 1} (e^* (m) q/q)}{n^{5/2} (qa_B)^5},$$

что естественно совпадает с асимптотиками точных выражений для формфакторов, рассчитанных в 13.80.

13.85. Как и в предыдущих задачах, сечения процессов могут быть связаны с электрическим формфактором ядра

$$F_{i \rightarrow f}(\mathbf{q}) = \langle f | \sum_p e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_p} | i \rangle \quad \text{для соответствующих переходов}$$

(суммирование проводится по всем протонам ядра, \mathbf{r}_p — их радиусы-векторы относительно центра масс ядра).

Специфика нерелятивистских столкновений легкой частицы с ядром определяется тем, что для них $qr_p \leq pR/\hbar \ll 1$ (R — радиус ядра, $p = mV$ — импульс налетающей частицы), так что в выражении для формфактора можно выполнить разложение экспоненты и ограничиться первым не исчезающим членом разложения. При этом дифференциальные сечения рассматриваемых процессов $d\sigma_{E1}/dq^2 \propto q^{-2}$ и $d\sigma_{E0}/dq^2 = \text{const}$, а полные сечения

$$\sigma_{E1} = \frac{8\pi e^2}{\hbar^2 V^2} |\langle J=1, J_z=0 | d_z | 0 \rangle|^2 \ln \frac{p+p'}{p-p'} \quad (1)$$

(сечение просуммировано по проекциям момента p -состояния; хотя в нем фигурирует состояние с $J_z = 0$, следует, однако, иметь в виду, что выбор оси квантования z вдоль вектора \mathbf{q} зависит от угла рассеяния, сравнить с 13.80) и

$$\sigma_{E0} \approx \frac{4\pi}{9} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{p'}{p} |Q_0|^2, \quad Q_0 = \langle f | \sum_p r_p^2 | i \rangle \quad (2)$$

(параметр Q_0 определяет также вероятность внутренней конверсии при соответствующем переходе ядра, см. 11.68 и 11.69). В приведенных выражениях p' — импульс частицы после столкновения.

13.86. Ввиду малости радиуса ядерных сил время взаимодействия протона и нейтрона много меньше характерного атомного времени. Поэтому по отношению к электрону результат взаимодействия нейтрона с протоном можно рассматривать как внезапное изменение на $V = \hbar q / m_p$ скорости ядра-протона. Отсюда следует искомое соотношение между амплитудами рассматриваемых процессов:

$$f_{\text{пн}}(E, q) \approx f_{\text{пр}}(E, q) a(q), \quad (1)$$

где

$$a(q) = \int |\Psi_0(r)|^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} m_e \mathbf{V} \mathbf{r}\right) d^3r = \frac{1}{[1 + (q m_e a_B / 2 m_p)^2]^2} \quad (2)$$

— амплитуда вероятности атому остаться в основном состоянии (сравнить с 11.58; заметим, что $a(q)$ совпадает с атомным фактором, см. 13.80).

Так как $a(0) = 1$, то, воспользовавшись оптической теоремой и соотношением (1), заключаем, что полные сечения рассеяния нейтрона на протоне и на атоме водорода одинаковы⁵⁷⁾. Как видно из формул (1) и (2), дифференциальные сечения, $d\sigma/d\Omega = |f|^2$, начинают различаться лишь при $q a_B \gtrsim m_p / m_e$, что соответствует энергиям нейтрона, много большим атомной (так как $\hbar q \leq 2p$).

13.87. Энергия взаимодействия заряженной частицы с атомом на больших расстояниях, $r \gg a_B$, имеет вид (поляризационный потенциал, см. 11.49)

$$U(r) = \frac{Ze(d\mathbf{r})}{2r^3} = -\frac{1}{2} \beta \frac{(Ze)^2}{r^4}, \quad (1)$$

где Ze — заряд частицы, β — поляризуемость атома.

⁵⁷⁾ При этом существенно, что $m_n \approx m_p$. Совершенно иная ситуация имеет место при рассеянии нейтрона на протоне, связанном в молекуле. В случае тяжелой молекулы, $M \gg m_p$, сечение рассеяния при малых энергиях на связанном протоне в 4 раза превышает сечение рассеяния свободным нуклоном, см. [1, § 151], а также [15].

Расчет сечения рассеяния по квазиклассической формуле (см. 13.51)

$$\sigma = 4\pi \int \left\{ 1 - \cos \left[\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz \right] \right\} \rho d\rho \quad (2)$$

для степенного потенциала был выполнен в 13.52; применительно к поляризованному потенциалу (1) он дает

$$\sigma = \pi \Gamma \left(\frac{1}{3} \right) \left(\frac{\pi \beta Z^2 e^2}{4 \hbar v} \right)^{2/3}. \quad (3)$$

Сделаем несколько замечаний в связи с полученным результатом. Как следует из (3), существенные в процессе рассеяния расстояния имеют величину $\rho_0 \sim \sqrt{\sigma} \sim v^{-1/3}$ (в атомных единицах), положено $Z \sim 1$ и $\beta \sim a_B^3$ (такая же оценка следует из условия, что для $\rho \sim \rho_0$ аргумент косинуса — квазиклассическая фаза — порядка 1; заметим, что для $r \leq a_B$ формула (1) неприменима, однако в условиях задачи такие расстояния не играют существенной роли). Эти расстояния должны быть большими, $\rho_0 \gg 1$, чтобы можно было воспользоваться выражением (1); отсюда $v^{1/3} \ll 1$ (при этом также выполнено условие $\rho_0/v \gg \ll \omega_{ат}^{-1}$, обеспечивающее адиабатичность воздействия частицы на электроны атома; при нарушении его становятся существенными процессы динамического возбуждения атома и понятие потенциала взаимодействия теряет строгий смысл). С другой стороны, должно быть выполнено условие квазиклассичности: $l \sim \sim M \rho_0 v \gg 1$, отсюда $v^{2/3} \gg 1/M$ (M — масса рассеиваемой частицы). Таким образом, полученный результат (3) справедлив при выполнении условий

$$\left(\frac{m_e}{M} \right)^{3/2} v_{ат} \ll v \ll v_{ат}, \quad (4)$$

так что рассеиваемая частица должна быть тяжелой, $M \gg m_e$ (для электронов формула (3) неприменима).

13.88. Специфика расчета сечения рассматриваемого процесса резонансной перезарядки при относительной скорости сталкивающихся частиц, удовлетворяющей условиям $1/\sqrt{M} \ll v \ll 1$ (в атомных единицах, M — масса атома или иона), определяется следующими обстоятельствами. 1) Сечение перезарядки велико, $\sigma_{перез} \gg \pi a_B^2$, т. е. существенны большие прицельные параметры. 2) Относительное движение атомов квазиклассично, причем можно ограничиться приближением прямолинейных траекторий, так как $Mv^2 \gg 1$. 3) Состояния «внутренних» электронов атома

и иона в процессе столкновения изменяется, а совершающий переход «внешний» электрон можно рассматривать как находящийся в поле двух потенциалов нулевого радиуса действия. 4) Ввиду адиабатичности столкновения (для электронной подсистемы) существенны переходы лишь между близкими по энергии состояниями атомных систем, представляющими четное (g -) и нечетное (u -) состояния квазимолекулярного иона. Напомним, что при $R \rightarrow \infty$ эти состояния вырождены по энергии. С уменьшением расстояния, при $R_c = 1/\alpha$, нечетный терм выходит в непрерывный спектр (становится возможной ионизация), см. 11.28. Однако в процессе перезарядки существенны расстояния, много большие R_c .

В отмеченных условиях волновая функция внешнего электрона при больших расстояниях $\mathbf{R}(t) = \boldsymbol{\rho} + vt$ между атомами имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \exp\left(-i \int_{-\infty}^t E_g dt\right) \Psi_g + \exp\left(-i \int_{-\infty}^t E_u dt\right) \Psi_u \right\}, \quad (1)$$

где $E_{g,u}(R)$ и

$$\Psi_{g,u} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_0\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}\right) \pm \psi_0\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) \right\}$$

— энергия и в. ф. четного (нечетного) молекулярного терма на таких расстояниях, а $\psi_0(r)$ — волновая функция связанного состояния в изолированном потенциале нулевого радиуса, см. 4.10. Коэффициенты в суперпозиции (1) выбраны таким образом, что при $t \rightarrow -\infty$ в. ф. имеет вид $\Psi \approx C(t) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}/2)$, т. е. описывает электрон, локализованный вблизи одного атома, что соответствует иону до столкновения. Соответственно при $t \rightarrow +\infty$ коэффициент при волновой функции $\psi_0(\mathbf{r} + \mathbf{R}/2)$ (квадрат его модуля) определяет вероятность перезарядки для заданного расстояния:

$$W_{\text{перез}}(\boldsymbol{\rho}) = \sin^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} (E_u(R) - E_g(R)) \frac{dz}{2v} \right] \quad (2)$$

($R^2 = \rho^2 + z^2$, $z = vt$); при этом сечение перезарядки

$$\sigma_{\text{перез}}(v) = \int_0^{\infty} 2\pi\rho W_{\text{перез}}(\rho) d\rho \quad (3)$$

(сравнить формулы (2), (3) с выражением для сечения упругого рассеяния на потенциале $U(r)$ в квазиклассическом приближении, рассмотренным в 13.51).

Согласно 11.28 на больших расстояниях $E_u - E_g \approx 2\alpha e^{-\alpha R/R}$, где $\epsilon_{св} = \alpha^2/2$ — энергия связи электрона в ионе. Записав

$$e^{-\alpha R} \approx \exp[-\alpha \rho (1 + z^2/2\rho^2)],$$

находим значение интеграла в выражении (2) в случае $\alpha \rho \gg 1$, он равен

$$I(\rho) \approx \sqrt{\frac{2\pi\alpha}{\rho}} \frac{1}{v} e^{-\alpha\rho}.$$

Ввиду его резкой зависимости от ρ , аргумент синуса в (2) быстро уменьшается с ростом ρ . Поэтому доминирующий вклад в интеграл (3) дает область прицельных расстояний $\rho \leq \rho_0$, здесь $I(\rho_0) = 1$, в которой быстро осциллирующий множитель $\sin^2 I(\rho)$ можно заменить его средним значением, равным $1/2$, что дает

$$\sigma_{\text{перез}}(v) \approx \frac{1}{2} \pi \rho_0^2 \approx \frac{\pi}{2\alpha^2} \ln^2 \left[\frac{\alpha}{v} \sqrt{\frac{2\pi}{\ln \sqrt{2\pi\alpha^2/v^2}}} \right]. \quad (4)$$

Заметим, что значение ρ_0 из уравнения $I(\rho_0) = 1$, которое удобно записать в виде $\ln I(\rho_0) = 0$, можно получить последовательными итерациями. Первая итерация дает $\alpha \rho_0 = \ln(\sqrt{2\pi} \alpha/v)$.

Наконец подчеркнем, что большая величина сечения перезарядки (4) определяется тем, что для слабосвязанного электрона $\alpha \ll 1$.

13.89. Характерная особенность рассматриваемого процесса, приводящая к большой величине сечения передачи возбуждения (как и сечения упругого рассеяния), связана с вырождением по энергии при больших расстояниях между атомами состояний, отвечающих возбуждению одного из одинаковых (!) атомов. В такой ситуации, как и в рассмотренном в предыдущей задаче процессе перезарядки, при медленных столкновениях переходы между близкими по энергии состояниями происходят при достаточно больших значениях прицельного параметра. Взаимодействие атомов, носящее диполь-дипольный характер, обсуждалось в 11.55. По сравнению с предыдущей задачей теперь возникает усложнение, связанное с увеличением числа состояний: имеется по три как g -, так и u -терма. Соответствующие независимые состояния отвечают различным поляризационным состояниям возбужденного атома (с моментом $l = 1$).

Одно из таких состояний, отвечающее проекции момента $l_z = 0$ возбужденного атома с моментом $l = 1$, эволюционирует

независимо от двух других. При этом, как и в предыдущей задаче, поступательное движение атомов рассматривается квазиклассически в приближении прямолинейных траекторий и ось z выбрана перпендикулярно плоскости движения. Для этого состояния $U_{g,u} = \pm \frac{d^2}{3R^3}$, см. 11.55' и расчет сечения передачи возбуждения может быть выполнен непосредственно по формулам (2) и (3) из 13.88. Вычислив интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} (U_g(R) - U_u(R)) \frac{dz}{2v} = \frac{d^2}{3v} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{(\rho^2 + z^2)^{3/2}} = \frac{2d^2}{3\rho^2 v},$$

как и в предыдущей задаче, находим сечение передачи возбуждения с $l_z = 0$:

$$\sigma_0 = \int_0^{\infty} 2\pi\rho \sin^2\left(\frac{2d^2}{3\rho^2 v}\right) d\rho = \frac{2\pi d^2}{3v} \int_0^{\infty} \sin^2 x \frac{dx}{x^2} = \frac{\pi^2 d^2}{3v}. \quad (1)$$

Как и следовало ожидать, оно существенно превышает атомные размеры (напомним, что $v \ll 1$).

Для двух других поляризационных состояний возбужденного атома (с $l_z = \pm 1$, или с $l_{x,y} = 0$; см. 3.21, а также 3.41) вычисление сечения передачи возбуждения требует числовых расчетов. Это связано с тем, что между такими состояниями возникают переходы, т. е. в процессе передачи возбуждения может измениться поляризационное состояние атома. Дело в том, что выполненная в 11.55 диагонализация «мгновенного» гамильтониана основана на выборе оси квантования вдоль направления, проходящего через центры атомов. Но из-за их движения соответствующая «вращающаяся» система является неинерциальной. При переходе в такую систему в гамильтониане возникает дополнительное слагаемое, имеющее вид

$$\hat{V}_{\text{кор}} = -\hat{\Omega} \hat{\Gamma} = -\frac{1}{I} \hat{L}_z \hat{I}_z = -\frac{v\rho}{R^2} \hat{I}_z$$

— кориолисово взаимодействие⁵⁸), сравнить с 6.29. Этот оператор не коммутирует с операторами симметрии «мгновенного» гамильтониана и приводит к переходам между собственными состояниями последнего, исключая отмеченный выше случай $l_z = 0$. Что же касается оценки сечений передачи возбуждения для

⁵⁸) Здесь $\hat{\Gamma}$ — оператор момента относительного движения атомов, $I = \mu R^2$ — момент инерции относительно центра масс. В квазиклассическом приближении оператор $\hat{\Gamma}$ можно заменить единственной отличной от нуля компонентой момента $L_z = \mu v \rho$.

обсуждаемых поляризованных состояний атома, то она, очевидно, как и в (1), имеет вид $\sigma \sim \pi d^2/v$.

13.90. В соответствии с постановкой задачи в выражении (XIII.9) для амплитуды упругого рассеяния фазы рассеяния следует считать равными: $\delta_l = i\infty$, при этом $e^{2i\delta_l} = 0$, для $l < l_0 = kR$ и $\delta_l = 0$ для $l > l_0$. Такие значения δ_l соответствуют следующей физической картине (движение частиц квазиклассично, так как $kR \gg 1$): при прицельных параметрах частиц $\rho = l/k < R$ они «поглощаются» сферой, а при $\rho > R$ движутся свободно. При этом упругое рассеяние является проявлением волновых свойств частиц и по своей физической природе аналогично дифракции Фраунгофера на непрозрачном экране (в данном случае — поглощающем экране); оно описывается амплитудой рассеяния, сравнить с 13.57,

$$f_{\text{дифр}} = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) P_l(\cos\theta) \approx \frac{iR}{\theta} J_1(kR\theta), \quad \theta \ll 1. \quad (1)$$

Воспользовавшись оптической теоремой, находим полное сечение столкновения

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f_{\text{дифр}}(\theta=0) = 2\pi R^2. \quad (2)$$

Сечение неупругого рассеяния (сечение поглощения частиц) равно

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - |S_l|^2) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) \approx \pi R^2, \quad (3)$$

а сечение упругого рассеяния

$$\sigma_{\text{el}} = \sigma_{\text{tot}} - \sigma_{\text{inel}} \approx \pi R^2; \quad (4)$$

этот результат получается и непосредственным вычислением по формуле

$$\sigma_{\text{el}} = \int |f_{\text{дифр}}|^2 d\Omega = \pi R^2,$$

как и в 13.57.

13.91. Характерные особенности рассматриваемых процессов определяются малостью радиуса $R_{\text{ан}}$ аннигиляционного взаимодействия, так что в нерелятивистском случае $kR_{\text{ан}} \ll 1$. Поэтому аннигиляционные процессы наиболее существенны для s -состояний. Влияние короткодействующего взаимодействия на s -состояния описывается лишь одним параметром $a_0^{(S)}$ — длиной рассеяния (для момента $l=0$) на изолированном центре,

см. 13.36 и 13.37. При наличии неупругих процессов (аннигиляции) длина рассеяния имеет отличную от нуля мнимую часть. Соответственно и сдвиг уровня, см. 13.36, приобретает мнимую часть, определяющую ширину уровня,

$$\Gamma_{ns} = -2 \operatorname{Im} \Delta E_{ns} = -\frac{8\pi\hbar^2}{m_e} \left| \Psi_{ns}^{(0)}(0) \right|^2 \operatorname{Im} a_0^{(S)}. \quad (1)$$

Здесь учтено, что для позитрония приведенная масса $m = m_e/2$. $\Psi_{ns}^{(0)}(0)$ — волновая функция в нуле для невозмущенного состояния.

С другой стороны, изменение фазового сдвига s -волны для кулоновского потенциала, $U = -e^2/r$, под влиянием короткодействующего взаимодействия согласно 13.37 равно

$$\Delta\delta_0^{(S)}(k) = -\tilde{Q}_{k0}^2 k a_0^{(S)}, \quad (2)$$

при этом

$$\tilde{Q}_{k0}^2 = \frac{\pi}{k a_B (1 - \exp(-\pi/k a_B))}, \quad \left| \Psi_{ns}^{(0)}(0) \right|^2 = \frac{1}{8\pi a_B^3}, \quad (3)$$

где $a_B = \hbar^2/m_e e^2$ (в формулах (3) учтено, что радиус Бора для позитрония в два раза больше атомного). По фазовому сдвигу амплитуды упругого рассеяния (его мнимой части) находим сечение аннигиляции

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ан}} &= \frac{\pi}{k^2} (1 - |S_0|^2) = \frac{\pi}{k^2} (1 - \exp(-4 \operatorname{Im} \Delta\delta_0^{(S)})) \approx \\ &\approx \frac{4\pi}{k^2} \operatorname{Im} \Delta\delta_0^{(S)} = -\frac{4\pi}{k} \tilde{Q}_{k0}^2 \operatorname{Im} a_0^{(S)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Согласно формулам (1) и (4) приходим к искомому соотношению

$$\Gamma_{ns} = \hbar \left| \Psi_{ns}^{(0)}(0) \right|^2 \frac{1}{\tilde{Q}_{k0}^2} (v \sigma_{\text{ан}}(v)), \quad (5)$$

здесь $v = \hbar k/m = 2\hbar k/m_e$ — относительная скорость электрон-позитронной пары. В случае $\hbar v/e^2 \gg 1$, когда кулоновский потенциал можно рассматривать как возмущение, соотношение (5) несколько упрощается, так как при этом $\tilde{Q}_{k0}^2 \approx 1$.

В заключение подчеркнем, что как сечение аннигиляции, так и ширина уровней позитрония (а соответственно и их время жизни $\tau = \hbar/\Gamma$) существенно зависят от значения суммарного спина электрон-позитронной пары, см. 11.61, так что орто- и парасостояния позитрония следует рассматривать отдельно. Отметим также, что полученные результаты непосредственно переносятся на адронные атомы. Однако условие их применимости

предполагает, что в сильном короткодействующем потенциале нет s -уровня с малой энергией связи, см. 11.4, а также 11.74.

13.92. Согласно принципу детального равновесия для двух взаимно обратных реакций $A \rightleftharpoons B$ справедливо соотношение

$$\frac{\bar{\sigma}_{A \rightarrow B}}{\bar{\sigma}_{B \rightarrow A}} = \frac{g_B p_B^2}{g_A p_A^2}. \quad (1)$$

Здесь $\bar{\sigma}$ — полные сечения соответствующих реакций $A \rightarrow B$ и $B \rightarrow A$, усредненные по спинам частиц в начальном и просуммированные по спинам частиц в конечном состояниях; $g_{A, B}$ — спиновые статистические веса, $p_{A, B}$ — импульсы относительного движения в двухчастичных системах A и B , взятые при одной и той же энергии в с.ц.и. (аналогичные соотношения имеют место не только для полных, но и для дифференциальных сечений реакций, см. [1, § 144]).

В рассматриваемом случае реакций $n + p \rightleftharpoons d + \gamma$ имеем $\sigma_{A \rightarrow B} \equiv \sigma_{\text{захв}}$ (сечение радиационного захвата нейтрона) и $\sigma_{B \rightarrow A} \equiv \sigma_{\text{ф-р}}$ (сечение фоторасщепления дейтрона). Так как спиновый (поляризационный) статистический вес для частицы со спином s равен $g_s = (2s + 1)$ (исключая фотон, для которого $g_\gamma = 2$ ввиду поперечности его поляризации), то

$$g_A = (2s_p + 1)(2s_n + 1) = 4, \quad g_B = g_\gamma (2s_d + 1) = 6. \quad (2)$$

Импульсы $p_{A, B}$, входящие в соотношение (1), равны импульсам частиц в системах A, B в с.ц.и. Для рассматриваемых реакций $p_A \equiv p_p = p_n$ и $p_B \equiv p_\gamma = p_d$. Считая все частицы нерелятивистскими (исключая, конечно, фотон; для него имеем $E_\gamma \ll Mc^2$, где M — масса нуклона), согласно закону сохранения энергии получаем

$$E_A = \frac{1}{M} p_A^2 = E_B = E_\gamma + E_d - \epsilon_0 \approx \hbar\omega - \epsilon_0. \quad (3)$$

Здесь ϵ_0 — энергия связи дейтрона, ω — частота фотона; значением E_d пренебрежено по сравнению с E_γ (для нерелятивистского дейтрона $E_d \ll E_\gamma$ при одинаковом импульсе с фотоном).

Учитывая, что $p_\gamma = \hbar\omega/c$, согласно соотношениям (1)–(3) находим

$$\frac{\sigma_{\text{захв}}}{\sigma_{\text{ф-р}}} = \frac{3}{2} \frac{\hbar\omega}{Mc^2} \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega - \epsilon_0}. \quad (4)$$

Отсюда следует, что в нерелятивистском случае, $\hbar\omega \ll Mc^2$, вообще говоря, $\sigma_{\text{ф-р}} \gg \sigma_{\text{захв}}$. Исключением является узкая область

значений $\hbar\omega$ волизи порога реакции $\gamma + d \rightarrow n + p$ (при этом $\hbar\omega \approx \varepsilon_0$), в которой, наоборот, $\sigma_{\text{ф-р}} \ll \sigma_{\text{захв}}$.

В заключение подчеркнем, что соотношение (4), как и (1), не связано с каким-либо предположением о механизме реакций, а основано только на симметрии уравнений квантовой механики относительно отражения времени.

13.93. Задача решается аналогично предыдущей (более того, рассмотренные в этих двух задачах процессы родственны и по своей физической природе, см. также 14.18 и 14.19). Усредненные по спидам сечения взаимно обратных реакций фотоэффекта, $\gamma + \text{H} \rightarrow e + p$, и радиационной рекомбинации, $e + p \rightarrow \text{H} + \gamma$, связаны соотношением

$$\frac{\sigma_{\text{ф}}(\omega)}{\sigma_{\text{рек}}(\varepsilon_e)} = \frac{p_e^2}{2p_{\gamma}^2} = \frac{\hbar\omega - |E_0|}{\hbar\omega} \frac{m_e c^2}{\hbar\omega}. \quad (1)$$

Для получения (1) следует учесть, что с. ц. и. для рассматриваемых реакций совпадает с системами покоя атома водорода и протона, спиновый статистический вес для атома водорода в основном состоянии⁵⁹⁾ равен 4, как и для системы $e + p$. Энергии фотона и электрона связаны законом сохранения энергии

$$\hbar\omega + E_0 = \varepsilon_e = \frac{1}{2m_e} p_e^2,$$

где E_0 — энергия основного состояния атома водорода.

Г л а в а 14

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

14.1. Волновые функции начального и конечного состояний атома водорода имеют вид, см. (IV. 4),

$$\begin{aligned} \Psi_i = \Psi_{2,1,m} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (\varepsilon(m) \cdot \mathbf{n}) \frac{r}{\sqrt{24a_B^5}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{r}{a_B}\right), \\ \Psi_f = \Psi_{1,0,0} &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right), \quad \hbar\omega = \varepsilon_i - \varepsilon_f = \frac{3e^2}{8a_B}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\varepsilon(m)$ — единичный вектор, $|\varepsilon|^2 = 1$, описывающий поляризационное состояние атома водорода с орбитальным момен-

⁵⁹⁾ При этом пренебрежено сверхтонкой структурой основного состояния атома водорода, см. 11.2. Заметим также, что для процессов с участием атома водорода в состояниях с орбитальным моментом l «спиновый» статистический вес для H равен уже $4(2l+1)$.

том $l = 1$. При этом матричный элемент дипольного момента перехода

$$d_{fi} = \int \Psi_f^* (-e\mathbf{r}) \Psi_i d^3r = -\frac{128\sqrt{2}}{243} ea_B e(m), \quad (2)$$

сравнить с 3.41 и 3.42. Согласно (XIV.10) вероятность рассматриваемого перехода $2p \rightarrow 1s$ атома водорода с излучением фотона

$$\omega = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{c}{a_B} = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{m_e e^4}{\hbar^3}. \quad (3)$$

Время жизни $\tau = 1/\omega$ и ширина уровня $\Gamma = \hbar/\tau = \hbar\omega$ для $2p$ -состояния атома водорода составляют:

$$\omega \approx 0,63 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}, \quad \tau \approx 1,60 \cdot 10^{-9} \text{ с}, \quad \Gamma \approx 0,41 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}.$$

Время жизни $2p$ -уровня μ -мезоатома ($m_\mu \approx 207m_e$) составляет $\approx 10^{-11}$ с. Это значение много меньше времени жизни свободного мюона и позволяет понять то обстоятельство, что мюон, будучи захваченным на атомную орбиту, успевает до своего распада путем ряда каскадных переходов перейти на основной уровень (это замечание справедливо и для пионных атомов, $\tau_{\pi^\pm} \approx 2,6 \cdot 10^{-8}$ с).

14.2. Волновые функции сферического осциллятора обсуждались в 4.4 и 4.5. Для начального и конечного состояний в рассматриваемом случае они имеют вид (сравнить с предыдущей задачей)

$$\begin{aligned} \Psi_i &= \Psi_{N-1} = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi^3} a^5}\right)^{1/2} (\varepsilon(m)\mathbf{r}) e^{-r^2/2a^2}, \quad |\varepsilon|^2 = 1, \\ \Psi_f &= \Psi_{N=0} = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi^3} a^3}\right)^{1/2} e^{-r^2/2a^2}, \quad a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Так как первый возбужденный уровень осциллятора имеет орбитальный момент $l = 1$, то излучение фотона носит дипольный характер. Матричный элемент дипольного момента перехода ($\mathbf{d} = e\mathbf{r}$)

$$d_{fi} = e \sqrt{\frac{2}{\pi^3 a^8}} \int (\varepsilon\mathbf{r}) \mathbf{r} e^{-r^2/2a^2} d^3r = \frac{1}{\sqrt{2}} ea\varepsilon, \quad (2)$$

и вероятность излучения фотона (в единицу времени) оказывается равной

$$\omega = \frac{2}{3} \frac{e^2 a^2 \omega^3}{\hbar c^3} = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \left(\frac{\hbar\omega}{mc^2}\right) \omega, \quad (3)$$

как видно, $\omega \ll \omega$.

14.3. Волновые функции начального ($l = 1$) и конечного ($l = 0$) состояний ротатора имеют вид (сравнить с двумя предыдущими задачами и с 3.2):

$$\Psi_i = Y_{1m} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \varepsilon(m) \mathbf{n}, \quad \Psi_f = Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}.$$

Матричный элемент дипольного момента перехода ($\mathbf{d} = d_0 \mathbf{n}$)

$$d_{fi} = \int \Psi_f^* d_0 \mathbf{n} \Psi_i d\Omega = \frac{\sqrt{3} d_0}{4\pi} \int \mathbf{n} (\varepsilon \mathbf{n}) d\Omega = \frac{1}{\sqrt{3}} d_0 \varepsilon,$$

а вероятность излучения фотона согласно (XIV. 10)

$$w = \frac{4d_0^2 \omega^3}{9\hbar c^3}, \quad \hbar\omega = \varepsilon_i - \varepsilon_f = \frac{\hbar^2}{I} \quad (1)$$

(заметим, что взаимодействие ротатора с полем излучения описывается выражением (XIV. 12)).

14.4. Свойства вращательных состояний двухатомной молекулы с $\Lambda = 0$ аналогичны свойствам сферического ротатора с моментом инерции $I = \mu R^2$, где μ — приведенная масса ядер молекулы, а R — равновесное расстояние между ними. Отмеченная ранее в 11.40 аналогия свойств молекулы и ротатора, имеющих собственный дипольный момент, в электрическом поле непосредственно переносится и на процессы излучения фотона при чисто вращательных переходах молекулы. При этом вероятность рассматриваемого процесса описывается формулой (1) предыдущей задачи.

Оценка вероятности излучения существенно отличается от типичного значения $w_{ат} \sim 10^9 \text{ с}^{-1}$ для дипольного излучения атомов (сравнить с 14.1) ввиду малости, $\sim m_e/\mu$, энергии вращения молекулы по сравнению с электронной энергией, см. 11.25, а соответственно и частоты излучаемого фотона. Так как $w \propto \omega^3$, то для вероятности излучения при вращательных переходах молекулы получаем оценку $w_{мол} \sim 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ (для конкретности положено $\mu = 3m_p$).

В заключение заметим, что излучение с более высоких вращательных уровней в дипольном приближении происходит лишь при переходах на ближайший уровень, т. е. вращательный момент молекулы изменяется на 1: $K_f = K_i - 1$. При этом частота излучаемого фотона $\omega = \hbar K_i/I$, а вероятность излучения, просуммированная по независимым конечным состояниям ротатора (с различными значениями проекции момента), описывается выражением

$$w(K \rightarrow K - 1) = \frac{4d_0^2 \omega_K^3}{3\hbar c^3} \frac{K}{2K + 1}.$$

14.5. а) Оператор дипольного момента $\mathbf{d} = \sum_a e a \mathbf{r}_a$ зависит

только от пространственных координат и поэтому коммутирует с любым спиновым оператором. В частности, $\widehat{\mathbf{d}}\widehat{\mathbf{S}}^2 - \widehat{\mathbf{S}}^2\widehat{\mathbf{d}} = 0$, где $\widehat{\mathbf{S}}$ — суммарный спин системы. Матричный элемент этого соотношения, отвечающий переходу между состояниями $\Psi_{i, f}$ с определенными значениями $S_{i, f}$, дает

$$[S_i(S_i + 1) - S_f(S_f + 1)] \langle \Psi_f | \widehat{\mathbf{d}} | \Psi_i \rangle = 0.$$

Отсюда для $S_i \neq S_f$ следует $\mathbf{d}_{fi} = 0$, так что дипольное излучение для таких переходов отсутствует.

б) Все состояния тонкой структуры одного и того же атомного термина имеют одинаковую четность (так как в них электроны занимают одни и те же одночастичные орбитальные состояния). Учитывая антикоммутируемость операторов отражения \widehat{I} и дипольного момента, $\widehat{I}\widehat{\mathbf{d}} + \widehat{\mathbf{d}}\widehat{I} = 0$, и вычисляя матричный элемент этого равенства между состояниями $\Psi_{i, f}$ с определенными четностями, получаем $(I_i + I_f)\mathbf{d}_{fi} = 0$. Отсюда следует запрет на дипольное излучение при переходах между состояниями с одинаковой четностью рассматриваемой системы частиц.

14.6. Волновые функции начального и конечного состояний атома водорода имеют вид, см. (IV. 4),

$$\begin{aligned} \Psi_i &= \Psi_{200}\chi_i = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_B^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) e^{-r/2a_B} \chi_i, \\ \Psi_f &= R_{21}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (\widehat{\sigma}\mathbf{n}) \chi_f = \frac{1}{\sqrt{96\pi a_B^5}} r e^{-r/2a_B} (\widehat{\sigma}\mathbf{n}) \chi_f. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь спинор χ_i характеризует спиновое состояние электрона в начальном $2s_{1/2}$ -состоянии атома, а спинор $(\widehat{\sigma}\mathbf{n})\chi_f$ определяет спин-угловую часть волновой функции $2p_{1/2}$ -состояния, см. 5.21; спиноры $\chi_{i, f}$ нормированы условием $\langle \chi | \chi \rangle = 1$.

Матричный элемент дипольного момента перехода $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ атома водорода

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{fi} &= -\frac{e}{16\sqrt{3}\pi a_B^4} \chi_f^* \left\{ \int r \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) \mathbf{r} (\widehat{\sigma}\mathbf{n}) e^{-r/a_B} dV \right\} \chi_i = \\ &= \sqrt{3} e a_B \chi_f^* \widehat{\sigma} \chi_i, \end{aligned} \quad (2)$$

как и вероятность излучения фотона согласно (XIV. 10), зависит от выбора значений проекций момента в начальном и конечном состояниях атома. Суммирование вероятности перехода по двум независимым значениям проекции момента $j_z = \pm 1/2$ атома

в конечном состоянии, выполняемое с помощью соотношения

$$\sum_{m=\pm 1/2} |\langle \chi_f(m) | \hat{\sigma} | \chi_i \rangle|^2 = \sum_m \langle \chi_i | \hat{\sigma} | \chi_f(m) \rangle \langle \chi_f(m) | \hat{\sigma} | \chi_i \rangle = \\ = \langle \chi_i | \hat{\sigma} \cdot \hat{\sigma} | \chi_i \rangle = 3 \langle \chi_i | \chi_i \rangle = 3,$$

дает полную вероятность рассматриваемого перехода

$$w(2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}) = 12 \frac{e^2 a_B^2 \omega^3}{\hbar c^3} \quad (3)$$

(она уже, естественно, не зависит от начального спинового состояния электрона ввиду изотропии пространства); ее числовое значение составляет ($\hbar\omega = \Delta E_{LS} \approx 4,4 \cdot 10^{-6}$ эВ):

$$w \approx 0,81 \cdot 10^{-9} \text{ с}, \quad \tau = 1/w \approx 39 \text{ лет} \quad (4)$$

(1 год составляет $3,15 \cdot 10^7$ с). Столь малая вероятность дипольного перехода и соответственно большое время жизни, сравнить с 14.1 и 14.4, определяются исключительно малым значением частоты излучаемого фотона. В связи с данной задачей см. также 14.8.

14.7. Взаимодействие частицы с электромагнитным полем описывается выражением

$$\hat{U} = -\hat{\mu} (\mathcal{H}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}(\mathbf{r})), \quad (1)$$

сравнить с (XIV.2), где

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}} = \text{rot } \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V} \right)^{1/2} i \left[\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right].$$

Пренебрегая влиянием орбитального движения частицы на излучение¹⁾, будем рассматривать только спиновую степень свободы, положив $\mathbf{r} = 0$. При этом слагаемое $\hat{H}_0 \equiv -\hat{\mu}\mathcal{H}_0 = -\mu\mathcal{H}_0\hat{\sigma}_z$ в выражении (1) для \hat{U} (ось z направлена вдоль внешнего магнитного поля) имеет смысл невозмущенного гамильтониана спиновой подсистемы. Его собственные функции и собственные значения описываются выражениями

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad E_1^{(0)} = -\mu\mathcal{H}_0; \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad E_2^{(0)} = \mu\mathcal{H}_0.$$

Считая, для определенности, что $\mu > 0$, замечаем, что $E_2^{(0)} > E_1^{(0)}$, и под действием возмущения $\hat{V} = -\hat{\mu}\hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}(0)$ воз-

¹⁾ При этом, в частности, пренебрегается доплеровским уширением спектральной линии.

возможен переход из состояния Ψ_2 в Ψ_1 , сопровождающийся излучением фотона с энергией $\hbar\omega = E_2^{(0)} - E_1^{(0)} = 2\mu\mathcal{H}_0$ (при этом состояние Ψ_1 стабильно относительно излучения; в случае $\mu < 0$ роли состояний $\Psi_{1,2}$ взаимно заменяются).

Преобразования, аналогичные (XIV.3)—(XIV.7), приводят к следующему выражению для дифференциальной вероятности рассматриваемого перехода

$$d\omega_{n\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 d\rho_f = \frac{\mu^2\omega}{2\pi\hbar c} \left| [ke_{k\sigma}^*] \Psi_1^* \hat{\sigma} \Psi_2 \right|^2 d\Omega_n, \quad (2)$$

Обозначив здесь

$$\mu_{12} = \mu \Psi_1^* \hat{\sigma} \Psi_2 \equiv \mu \sigma_{12},$$

что является матричным элементом оператора магнитного момента перехода, и введя вектор $a_{12} = [k\mu_{12}]$, перепишем выражение (2) в виде

$$d\omega_{n\sigma} = \frac{\omega}{2\pi\hbar c} \left| e_{k\sigma}^* a_{12} \right|^2 d\Omega_n, \quad (3)$$

сравнить с (XIV.7). Суммирование по поляризациям фотона, выполняемое как и в (XIV.8), (XIV.9), дает (при этом учтено, что $ka_{12} = 0$):

$$d\omega_n = \sum_{\sigma} d\omega_{n\sigma} = \frac{\omega}{2\pi\hbar c} \{k^2 |\mu_{12}|^2 - (k\mu_{12})(k\mu_{12})^*\} d\Omega_n, \quad (4)$$

и после интегрирования по направлениям вылета фотона получаем

$$\omega = \int d\omega_n = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mu_{12}|^2 \quad (5)$$

(при этом использовано значение интеграла

$$\int (\mathbf{ak})(\mathbf{bk}) d\Omega = a_i b_k \int k_i k_k d\Omega = a_i b_k \frac{4\pi}{3} k^2 \delta_{ik} = \frac{4\pi}{3} k^2 (\mathbf{ab})).$$

Заметим, что выражения (3)—(5) являются фактически общими формулами теории магнитно-дипольного излучения.

Учтя явный вид функций $\Psi_{1,2}$ и матриц Паули, находим матричные элементы

$$(\sigma_x)_{12} = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1, \quad (\sigma_y)_{12} = -i, \quad (\sigma_z)_{12} = 0$$

и приходим к окончательному выражению для полной вероятности излучения фотона, сопровождающего «переворот» спина

$$\omega = \frac{64}{3} \frac{\mu^5 \chi_0^3}{\hbar^4 c^3}. \quad (6)$$

14.8. Взаимодействие V_{int} электрона с полем излучения описывается выражением (XIV.2), в котором следует положить $\mu_a = -e\hbar/2mc$ ($-e$ — заряд электрона). Матричный элемент такого возмущения для однофотонного перехода дается формулой (XIV.4), в которой под волновыми функциями начального и конечного состояний $\Psi_{i,f} = \Psi_{ns}(r)\chi_{i,f}$ следует понимать в.ф. соответствующих ns -состояний атома водорода с учетом спинового состояния электрона. При этом первое слагаемое в матричном элементе $\langle f | \hat{V}_{\text{int}} | i \rangle$, включающее оператор $\hat{\mathbf{p}}$, обращается в нуль. Действительно, ввиду сферической симметрии в.ф. Ψ_{ns} замечаем, что матричный элемент

$$\langle \Psi_{1s} | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | \Psi_{2s} \rangle \propto \mathbf{k}, \quad \text{а} \quad \mathbf{k} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} = 0.$$

Таким образом, для рассматриваемого перехода атома водорода

$$\langle f | \hat{V}_{\text{int}} | i \rangle = -\frac{ie\hbar}{2m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}} \langle 1s | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | 2s \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \langle \chi_1 | [\hat{\sigma}\mathbf{k}] | \chi_2 \rangle. \quad (1)$$

Ввиду того, что $ka_B \ll 1$, в матричном элементе можно выполнить разложение экспоненты (впрочем, соответствующий интеграл можно вычислить точно, см. значение формфактора $F_{1s \rightarrow 2s}(q)$ в 13.80). Первые два члена разложения, $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \approx 1 - i\mathbf{k}\mathbf{r}$, дают нуль (первый — из-за ортогональности в.ф., второй — ввиду нечетности подынтегральной функции), так что

$$\langle 1s | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | 2s \rangle \approx -\frac{1}{2} \int \Psi_{1s}^*(r) (\mathbf{k}\mathbf{r})^2 \Psi_{2s}(r) d^3r.$$

Интеграл здесь равен $2^9 \sqrt{2} k^2 a_B^2 / 3^6$ (в сферических координатах интегрирование по углам дает $\int (\mathbf{k}\mathbf{r})^2 d\Omega = \frac{4\pi}{3} k^2 r^2$, последующее интегрирование по r , с учетом явного вида в.ф. $\Psi_{1(2)s}$, выполняется элементарно); дифференциальная вероятность излучения фотона

$$d\omega_{n\sigma} = \frac{2^{14} e^2 \hbar a_B^4 \omega^5}{3^{12} \pi m^2 c^7} |(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* [\sigma_{12}\mathbf{k}])|^2 d\Omega_n, \quad (2)$$

сравнить с переходом от (XIV.5) к (XIV.7), а также с формулой (3) из предыдущей задачи. В выражении (2)

$$\hbar\omega = \hbar kc = E_{2s} - E_{1s} = 3e^2/8a_B$$

и введено обозначение $\sigma_{12} = \langle \chi_1 | \hat{\sigma} | \chi_2 \rangle$. Суммирование в формуле (2) по поляризациям фотона и последующее интегрирование по направлениям его вылета, выполняемые как и в предыдущей задаче, дают вероятность перехода

$$\omega_{12} = \frac{2^{17} e^2 \hbar a_B^4 \omega^7}{3^{13} m^2 c^9} |\sigma_{12}|^2 = \frac{1}{2^4 \cdot 3^6} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^9 |\sigma_{12}|^2 \frac{m e^4}{\hbar^3}. \quad (3)$$

Она зависит от спиновых состояний электрона. Чтобы найти полную вероятность излучения при переходе $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ атома водорода, выражение (3) следует просуммировать по двум независимым спиновым состояниям $1s$ -электрона; поступая как в 14.6, получаем

$$\omega (2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}) = \frac{1}{2^4 \cdot 3^5} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^9 \frac{m e^4}{\hbar^3} \approx 0,62 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}, \quad (4)$$

что соответствует времени жизни $2s_{1/2}$ -состояния по отношению к рассматриваемому переходу $\tau = 1/\omega \approx 18$ дней.

Сравнение результатов данной задачи и задачи 14.6 с вероятностью двухфотонного перехода $\omega_{2\gamma} \approx 8 \text{ с}^{-1}$ показывает, что однофотонное излучение из $2s_{1/2}$ -состояния имеет существенно меньшую (на много порядков) вероятность, чем двухфотонный переход, т. е. оно сильно подавлено. В условиях 14.6 такое подавление имеет очевидную причину — малость частоты излучаемого фотона, в то время как вероятность излучения $\omega_{E1} \propto \omega^3$.

Подавление однофотонного перехода $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$, носящего магнитный дипольный характер, объясняется тем обстоятельством, что в пренебрежении запаздыванием, $e^{-ikr} \approx 1$, он является запрещенным из-за ортогональности координатных частей волновых функций, как отмечалось выше. В связи с этим следует отметить, что малость матричного элемента (имеющая порядок величины $k^2 a_B^2 \sim \alpha^2 = (1/137)^2$ и соответственно $\alpha^4 \sim 10^{-9}$ в выражении для вероятности излучения), возникающая при разложении экспоненты, имеет такой же порядок величины, как и релятивистские поправки к волновым функциям. Учет последних приводит к увеличению значения вероятности (4) в 9 раз, см. [29, § 52] (так что рассмотрение, проведенное в данной задаче, носит лишь качественный характер).

14.9. В основном состоянии атома водорода с ядром-протоном триплетный уровень, $S = 1$, сверхтонкой структуры выше синглетного, $S = 0$, на $\Delta E_{\text{HFS}} = 1420 \text{ МГц} \approx 5,9 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$, см. 11.2. Волновые функции этих состояний имеют вид (для опре-

деленности ограничимся рассмотрением триплетного состояния с $S_z = 0$)

$$\begin{aligned} \Psi_i &= \Psi_{1s}\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\} \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}, \\ \Psi_f &= \Psi_{1s}\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\} \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь χ_{SS_z} — спиновые функции электрон-протонной системы.

Матричный элемент взаимодействия (XIV.2) для однофотонного перехода между состояниями (1) атома имеет вид

$$\langle f | \hat{V}_{\text{int}} | i \rangle = -\frac{ie\hbar}{2m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}} \langle 1s | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | 1s \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* \langle \chi_{00} | [\hat{\boldsymbol{\sigma}}_e \mathbf{k}] | \chi_{10} \rangle,$$

сравнить с выводом формулы (1) из предыдущей задачи (при этом пренебрежено взаимодействием магнитного момента протона с полем излучения, так как оно примерно в $m_p/m_e \approx 2 \cdot 10^3$ раз слабее, чем для электрона). Заменяя экспоненту единицей и элементарно вычислив компоненты вектора

$$\sigma_{12} = \langle \chi_{00} | \hat{\boldsymbol{\sigma}}_e | \chi_{10} \rangle = (0, 0, 1),$$

получаем

$$\langle f | \hat{V}_{\text{int}} | i \rangle = -\frac{ie\hbar}{2m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}^* [\sigma_{12} \mathbf{k}]. \quad (2)$$

Теперь обычным образом (сравнить, например, с решениями двух предыдущих задач) находим полную вероятность рассматриваемого перехода, носящего магнитный дипольный характер:

$$\omega = \frac{e^2 \hbar k^2 \omega |\sigma_{12}|^2}{3m^2 c^3} = \frac{1}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{(\Delta E_{\text{HFS}})^3}{\hbar m^2 c^4} \approx 3 \cdot 10^{-15} \text{ с}^{-1}, \quad (3)$$

что соответствует времени жизни триплетного уровня $\tau = 1/\omega \approx 10^7$ лет (столь большое значение его связано с малой величиной частоты излучаемого фотона, $\tau \propto \omega^{-3}$).

14.10. Вероятности однофотонных электромагнитных переходов (в единицу времени) различной мультипольности для не слишком сильно возбужденных состояний атома по порядку величины равны:

$$а) \quad \omega_{E1} \sim \frac{d_{12}^2 \omega^3}{\hbar c^3} \sim \alpha^3 \left(\frac{\omega}{\omega_{\text{ат}}} \right)^3 \omega_{\text{ат}} \quad (1)$$

для дипольного электрического, или $E1$ -перехода;

$$б) \quad \omega_{M1} \sim \frac{\mu_{12}^2 \omega^3}{\hbar c^3} \sim \alpha^5 \left(\frac{\omega}{\omega_{\text{ат}}} \right)^3 \omega_{\text{ат}} \quad (2)$$

для дипольного магнитного, или $M1$ -перехода;

$$в) \quad \omega_{E2} \sim \frac{Q_{12}^2 \omega^5}{\hbar c^5} \sim \alpha^5 \left(\frac{\omega}{\omega_{ат}} \right)^5 \omega_{ат} \quad (3)$$

для квадрупольного электрического, или $E2$ -перехода.

В приведенных оценках положено $d_{12} \sim ea_B$, $\mu_{12} \sim e\hbar/mc$, $Q_{12} \sim ea_B^2$ — характерные значения матричных элементов дипольного, магнитного, квадрупольного моментов, $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ — постоянная тонкой структуры, $\omega_{ат} = me^4/\hbar^3 = 4,13 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$. Для переходов между различными термами $\omega \sim \omega_{ат}$. При этом вероятности $M1$ и $E2$ переходов по порядку величины одинаковы (если они не запрещены правилами отбора) и в $\alpha^{-2} \sim \sim 10^4$ раз меньше вероятностей $E1$ переходов.

Специфика излучения при переходах между компонентами тонкой структуры одного и того же электронного терма определяется следующими двумя обстоятельствами. Во-первых, соответствующие состояния атома имеют одинаковую четность и $E1$ -переходы между ними запрещены, см. 14.5. Во-вторых, для таких переходов энергия излучаемых фотонов порядка интервала тонкой структуры терма, т. е. их частоты малы, $\omega \sim \sim \alpha^2 \omega_{ат}$. Сравнение (2) и (3) показывает, что при этом вероятность $E2$ -перехода в $\alpha^{-2} \sim 10^4$ раз меньше вероятности $M1$ -перехода. Таким образом, квадрупольное излучение сильно подавлено и доминирующими являются магнитные дипольные переходы. Так как для таких переходов правило отбора по моменту требует, чтобы $|\Delta J| = 0$ или 1, а энергия уровней тонкой структуры по мере увеличения J изменяется монотонно, то $M1$ -переходы осуществляются между соседними компонентами тонкой структуры терма. Оценка вероятности излучения согласно формуле (2) с $\omega \sim \alpha^2 \omega_{ат}$ дает

$$\omega_{M1} \sim \alpha^{11} \omega_{ат} = \alpha^{12} \frac{c}{a_B} \approx 10^{-7} \text{ с}^{-1}.$$

14.11. Для доказательства «правил сумм» следует воспользоваться условием полноты системы с.ф. гамильтониана, $\sum_m |m\rangle \langle m| = 1$, равенствами $\omega_{mn} = -\omega_{nm}$ и $x_{mn} = (x_{nm})^*$, а также соотношениями

$$\omega_{mn} x_{mn} = \frac{1}{\hbar} \langle m | [\hat{H}, \hat{x}] | n \rangle = - \frac{i}{\mu} \langle m | \beta_x | n \rangle,$$

$$\begin{aligned} \omega_{mn}^2 x_{mn} &= -i \frac{\omega_{mn}}{\mu} (p_x)_{mn} = - \frac{i}{\mu \hbar} \langle m | [\hat{H}, \beta_x] | n \rangle = \\ &= \frac{1}{\mu} \langle m | \frac{\partial U}{\partial x} | n \rangle. \end{aligned}$$

Учитывая сделанные замечания, выполним следующие преобразования.

$$а) \sum_m |\langle m | x | n \rangle|^2 = \sum_m \langle n | x | m \rangle \langle m | x | n \rangle = \langle n | x^2 | n \rangle;$$

$$б) \sum_m \omega_{mn} |\langle m | x | n \rangle|^2 = \frac{i}{2\mu} \sum_m \{ \langle n | \hat{p}_x | m \rangle \langle m | x | n \rangle - \\ - \langle n | x | m \rangle \langle m | \hat{p}_x | n \rangle \} = \frac{i}{2\mu} \langle n | [\hat{p}_x, \hat{x}] | n \rangle = \frac{\hbar}{2\mu};$$

$$в) \sum_m \omega_{mn}^2 |\langle m | x | n \rangle|^2 = \frac{1}{\mu^2} \sum_m \langle n | \hat{p}_x | m \rangle \langle m | \hat{p}_x | n \rangle = \\ = \frac{1}{\mu^2} \langle n | \hat{p}_x^2 | n \rangle;$$

$$г) \sum_m \omega_{mn}^3 |\langle m | x | n \rangle|^2 = -\frac{i}{2\mu^2} \sum_m \left\{ \langle n | \frac{\partial U}{\partial x} | m \rangle \langle m | \hat{p}_x | n \rangle - \right. \\ \left. - \langle n | \hat{p}_x | m \rangle \langle m | \frac{\partial U}{\partial x} | n \rangle \right\} = \frac{i}{2\mu^2} \langle n | \left[\hat{p}_x, \frac{\partial U}{\partial x} \right] | n \rangle = \\ = \frac{\hbar}{2\mu^2} \langle n | \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} | n \rangle.$$

Установленные соотношения справедливы и для других, y - и z -компонент. Соответственно если в левых частях соотношений заменить матричные элементы $|\langle m | x | n \rangle|^2$ на $|\langle m | r | n \rangle|^2$, то правые части окажутся равными:

$$а) \langle n | r^2 | n \rangle; \quad в) \frac{1}{\mu^2} \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle; \quad г) \frac{\hbar}{2\mu^2} \langle n | \Delta U | n \rangle.$$

Заметим, что для частицы в кулоновском потенциале, $U = -\alpha/r$, имеем $\Delta U = 4\pi\alpha\delta(r)$, так что в случае г) сумма оказывается равной

$$\sum_m \omega_{mn}^3 |\langle m | r | n \rangle|^2 = \frac{2\pi\alpha\hbar}{\mu^2} |\Psi_n(0)|^2$$

и обращается в нуль для состояний $|n\rangle$ с отличным от нуля орбитальным моментом.

14.12. Рассчитаем вероятность перехода в единицу времени системы «частица + фотон» из начального состояния, описываемого волновой функцией

$$\Psi_i = |1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \dots\rangle \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \mathbf{r}\right); \quad \mathbf{p}_1 = 0, \quad E_i = \hbar\omega_1, \quad (1)$$

в состоянии с волновой функцией

$$\Psi_f = |1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_2 \mathbf{r}\right); \quad E_f = \frac{p_2^2}{2m} + \hbar\omega_2 \quad (2)$$

под действием возмущения (сравнить с (XIV. 2))

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}^2(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Она определяется общей формулой теории возмущений второго порядка, см. [1, § 43],

$$d\omega_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{fi} + \sum'_v \frac{V_{fv}V_{vi}}{E_i - E_v} \right|^2 d\rho_f. \quad (4)$$

Специфика взаимодействия (3) как оператора возмущения в том, что оно включает в себя члены различного порядка малости — линейные и квадратичные — по параметру разложения теории возмущений, определяемому зарядом e частицы (фактически в процессах взаимодействия с полем излучения параметром разложения является $\alpha = e^2/\hbar c$). Соответственно учет эффектов, связанных со слагаемым $\propto e^2 \hat{\mathbf{A}}^2$ в первом порядке теории возмущений, должен производиться одновременно с учетом второго приближения по взаимодействию, определяемому первым членом в выражении (3). Вклад в матричный элемент V_{fi} дает лишь второе, $\propto e^2 \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}^2$, слагаемое в возмущении (3). В матричных же элементах V_{fv} и V_{vi} суммы по промежуточным состояниям должен учитываться вклад лишь первого в (3), линейного по « e » слагаемого. Так как в условиях данной задачи $\mathbf{p}\Psi_i = \mathbf{p}_1\Psi_i = 0$, то сумма в выражении (4) равна нулю и соответственно

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{V} | i \rangle &= \frac{e^2}{2mc^2} \langle f | \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) | i \rangle = \\ &= \frac{2\pi e^2 \hbar}{m \sqrt{\omega_1 \omega_2} V^2} (\mathbf{e}_2^* \mathbf{e}_1) \int \exp\left[i \left(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \frac{\mathbf{p}_2}{\hbar}\right) \mathbf{r}\right] d^3r = \\ &= \frac{2\pi e^2 \hbar}{m \sqrt{\omega_1 \omega_2} V} (\mathbf{e}_2^* \mathbf{e}_1) \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{p}_2/\hbar} \end{aligned} \quad (5)$$

сравнить с выводом (XIV. 4); использованы обозначения \mathbf{e}_i вместо $\mathbf{e}_{\mathbf{k}_i\sigma_i}$ и т. д.).

Появление в выражении (5) множителя $\delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{p}_2/\hbar}$ отражает сохранение импульса в процессе рассеяния фотона и означает, что конечное состояние системы полностью определяется заданием квантовых чисел \mathbf{k}_2, σ_2 фотона. При этом энергией

отдачи частицы можно пренебречь, так как

$$p_2 \sim \hbar k_{1,2} \ll mc, \quad E_2 = \frac{1}{2m} p_2^2 \sim \frac{1}{m} \hbar^2 k_{1,2}^2 \equiv \hbar kc \frac{\hbar k}{mc} \ll \hbar \omega_{1,2}$$

и, воспользовавшись выражением (XIV.6) для плотности конечных состояний dp_f с $\omega = \omega_2 \approx \omega_1$, согласно (4), (5) получить

$$d\sigma = \frac{V}{c} d\omega = \frac{e^4}{m^2 c^4} |(\mathbf{e}_2^* \mathbf{e}_1)|^2 d\Omega_2 \quad (6)$$

(о связи дифференциального сечения с вероятностью см. (XIV.14)).

Сделаем замечание о поляризационных явлениях при рассеянии фотона. Для векторной частицы (имеющей спин $s_V = 1$) с отличной от нуля массой зависимость амплитуды упругого рассеяния от векторов поляризации вида $f = A \mathbf{e}_2^* \mathbf{e}_1$ означает, что поляризационное состояние частицы при рассеянии остается неизменным. В случае рассеяния фотона ситуация иная из-за поперечности его поляризации. Это приводит, в частности, к возникновению поляризации даже при рассеянии неполяризованных фотонов. Так, при рассеянии под углом $\theta = \pi/2$ фотон оказывается полностью линейно поляризованным в направлении, перпендикулярном плоскости рассеяния.

Вычислим дифференциальное сечение рассеяния для неполяризованных фотонов. Записав $|(\mathbf{e}_2^* \mathbf{e}_1)|^2 = e_{2i}^* e_{1i} e_{2k} e_{1k}^*$, с помощью соотношения (XIV.8) в формуле (6) можно выполнить усреднение по поляризациям падающих и суммирование по поляризациям рассеянных фотонов и получить дифференциальное сечение рассеяния неполяризованных фотонов свободным зарядом (θ — угол рассеяния, $k_1 k_2 = k^2 \cos \theta$):

$$d\sigma = \frac{1}{2} r_0^2 (1 + \cos^2 \theta) d\Omega, \quad r_0 = e^2 / mc^2. \quad (7)$$

Здесь r_0 — классический радиус заряженной частицы [27]. Интегрирование по углам дает полное сечение рассеяния

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \quad (8)$$

(оно не зависит от поляризации падающего пучка фотонов).

Выражения (7) и (8) не содержат постоянной Планка и совпадают с соответствующими результатами — формулой Томсона — классической электродинамики (квантовые эффекты проявляются в релятивистской области, когда $\hbar \omega \gtrsim mc^2$).

14.13. Переход из начального состояния системы «ротатор + фотон», описываемого волновой функцией

$$\Psi_i = |1_{\mathbf{k}_i \sigma_i}, 0, \dots\rangle Y_{00}, \quad E_i = \hbar \omega_i,$$

$$\Psi_f = |1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle Y_{00}, \quad E_f = \hbar\omega_2$$

под влиянием взаимодействия ротатора²⁾ с полем излучения, $\hat{V} = -d_0 \mathbf{n} \hat{\mathcal{E}}_{\text{rad}}(0)$, см. (XIV.12), происходит во втором порядке теории возмущений. Вероятность его (в единицу времени) определяется согласно общей формуле, приведенной в предыдущей задаче. В рассматриваемом случае в ней $V_{fi} = 0$, а отличный от нуля вклад в сумму вносят лишь следующие промежуточные состояния:

$$\Psi_{v1} = Y_{1m}(\mathbf{n}) |1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle, \quad E_{v1} = \frac{\hbar^2}{I} + \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2;$$

$$\Psi_{v2} = Y_{1m}(\mathbf{n}) |0\rangle_v, \quad E_{v2} = \frac{\hbar^2}{I},$$

в которых ротатор находится на первом возбужденном уровне с $l = 1$ (для других состояний ротатора матричный элемент дипольного момента в операторе возмущения равен нулю). Учитывая, что $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ — частоты падающего и рассеянного фотонов одинаковы, и выражение (XIV.6) для плотности конечных состояний $d\rho_f$, находим

$$d\omega = \frac{d_0^4 \omega^4}{c^3 V} \left| \sum_m \langle Y_{00} | n_i | Y_{1m} \rangle \langle Y_{1m} | n_k | Y_{00} \rangle \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{e_{2i}^* e_{1k}}{\hbar\omega - \hbar^2/I} - \frac{e_{2k}^* e_{1i}}{\hbar\omega + \hbar^2/I} \right] \right|^2 d\Omega_2. \quad (1)$$

Сумму по m здесь легко вычислить, если заметить, что суммирование по m при $l = 1$ можно распространить на все возможные значения l, m , так как $\langle Y_{00} | \mathbf{n} | Y_{lm} \rangle \neq 0$ лишь для $l = 1$. Воспользовавшись после этого условием полноты системы шаровых функций, $\sum_{lm} |Y_{lm}\rangle \langle Y_{lm}| = 1$, и учтя значение интеграла

$$\langle Y_{00} | n_i n_k | Y_{00} \rangle = \frac{1}{4\pi} \int n_i n_k d\Omega = \frac{1}{3} \delta_{ik},$$

получаем дифференциальное сечение упругого рассеяния фотона сферическим ротатором, находящимся в основном состоянии,

$$d\sigma = \frac{V}{c} d\omega = \frac{1}{4\pi} \sigma_0 |(\mathbf{e}_2^* \mathbf{e}_1)|^2 \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \hbar^2/I^2)^2} d\Omega_2 \quad (2)$$

²⁾ Рассматриваем только внутреннюю степень свободы ротатора и, пренебрегая эффектами отдачи, считаем его, как целое, локализованным в точке $\mathbf{r} = 0$.

(о связи сечения рассеяния с вероятностью перехода см. (XIV. 14)), где

$$\sigma_0 = \frac{16\pi}{9} \frac{d_0^4}{l^2 c^4}. \quad (3)$$

Заметим, что поляризационные явления при упругом рассеянии фотона на ротаторе такие же, как и при рассеянии фотона свободным зарядом: сравнить выражение (2) с формулой (6) из предыдущей задачи и связанный с ней комментарий. Поступая как и в предыдущей задаче (усредняя и суммируя по поляризациям фотонов), находим дифференциальное сечение рассеяния неполяризованного пучка фотонов

$$d\sigma = \frac{1}{8\pi} \sigma_0 \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \hbar^2/l^2)^2} (1 + \cos^2 \theta) d\Omega. \quad (4)$$

Интегрирование по углам дает полное сечение упругого рассеяния фотонов невозбужденным ротатором

$$\sigma(\omega) = \frac{2}{3} \sigma_0 \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \hbar^2/l^2)^2}. \quad (5)$$

Отсюда в предельных случаях имеем

$$\sigma(\omega) \approx \begin{cases} \frac{2}{3} \sigma_0 \left(\frac{l\omega}{\hbar}\right)^4 & \text{при } \hbar\omega \ll \frac{\hbar^2}{l}, \\ \frac{2}{3} \sigma_0 & \text{при } \hbar\omega \gg \frac{\hbar^2}{l}. \end{cases} \quad (6)$$

При частоте $\omega \rightarrow \hbar/l$ сечение рассеяния неограниченно возрастает, что отражает его резонансный характер (*резонансная флуоресценция*), отвечающий возможности возбуждения ротатора при поглощении фотона (при таких частотах формулы (2), (4), (5) непосредственно не применимы; теперь при расчете сечения необходимо учитывать *естественную ширину* возбужденного уровня ротатора).

В связи с данной задачей см. также 14.14, где рассмотрено неупругое рассеяние фотонов ротатором.

14.14. Решение может быть получено в результате простых преобразований в формулах предыдущей задачи. Так как в случае $|l - l'| \neq 1$ матричные элементы $\langle Y_{lm} | \mathbf{n} | Y_{l'm'} \rangle = 0$, то замечаем, что во втором порядке теории возмущений, кроме упругого рассеяния, происходит неупругое рассеяние фотонов, сопровождающееся возбуждением состояний ротатора только с моментом $l = 2$. При этом для возможных конечных состояний системы имеем в. ф.

$$\Psi_f = Y_{2m}(\mathbf{n}) | 1_{\mathbf{k}, \sigma_f}, 0, \dots \rangle \quad \text{и} \quad E_f = \frac{3\hbar^2}{I} + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_1.$$

Поступая, как и в предыдущей задаче, получаем дифференциальное сечение неупругого рассеяния фотона ротатором

$$d\sigma_{2m} = \frac{d_0^4 \omega_1 \omega_2^3}{c^4} \left| \langle 2m | n_i n_k | 0 \rangle e_{2i}^* e_{1k} \right|^2 \frac{l^2}{(\hbar + l\omega_2)^2 (\hbar - l\omega_1)^2} d\Omega_2. \quad (1)$$

Выполним суммирование по проекциям момента m ротатора. Для этого запишем сначала

$$\left| \langle 2m | n_i n_k | 0 \rangle e_{2i}^* e_{1k} \right|^2 = e_{2i}^* e_{1k} e_{2l} e_{1m}^* \langle 0 | n_l n_m | 2m \rangle \langle 2m | n_i n_k | 0 \rangle$$

и воспользуемся соотношением

$$\begin{aligned} \sum_m \langle 0 | n_s n_t | 2m \rangle \langle 2m | n_i n_k | 0 \rangle &= \\ &= \sum_{lm} \langle 0 | n_s n_t | lm \rangle \langle lm | n_i n_k | 0 \rangle - \langle 0 | n_s n_t | 0 \rangle \langle 0 | n_i n_k | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | n_s n_t n_i n_k | 0 \rangle - \langle 0 | n_s n_t | 0 \rangle \langle 0 | n_i n_k | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{45} \{ 3\delta_{is} \delta_{kt} + 3\delta_{it} \delta_{ks} - 2\delta_{ik} \delta_{st} \}, \end{aligned}$$

при выводе которого учтено, что слагаемые суммы по l, m отличны от нуля лишь при значениях $l = 0$ и 2 , использованы условие полноты системы шаровых функций и значения интегралов

$$\begin{aligned} \langle 0 | n_i n_k | 0 \rangle &= \frac{1}{4\pi} \int n_i n_k d\Omega = \frac{1}{3} \delta_{ik}, \\ \langle 0 | n_i n_k n_s n_t | 0 \rangle &= \frac{1}{15} (\delta_{ik} \delta_{st} + \delta_{is} \delta_{kt} + \delta_{it} \delta_{ks}). \end{aligned}$$

В результате отмеченных преобразований получаем

$$d\sigma = \sum_m d\sigma_{2m} = \frac{d_0^4 \omega_1 \omega_2^3}{45c^4} \frac{l^2}{(\hbar + l\omega_2)^2 (\hbar - l\omega_1)^2} (3 + |e_2^* e_1|^2) d\Omega_2. \quad (2)$$

После усреднения и суммирования по поляризациям фотонов (соответственно до и после рассеяния, сравнить с 14.12) дифференциальное сечение неупругого рассеяния неполяризованных фотонов принимает вид

$$\frac{d\sigma_{\text{неупр}}}{d\Omega} = \frac{3}{160\pi} (13 + \cos^2 \theta) \sigma_{\text{неупр}}(\omega_1); \quad (3)$$

полное сечение неупругого рассеяния

$$\sigma_{\text{неупр}}(\omega_1) = \frac{16\pi}{27} \frac{d_0^4 \omega_1 \omega_2^3}{c^4} \frac{I^2}{(\hbar + I\omega_2)^2 (\hbar - I\omega_1)^2}. \quad (4)$$

Вблизи порога возбуждения ротатора, т. е. при $\hbar\omega_1 \rightarrow 3\hbar^2/I$, имеем

$$\sigma_{\text{неупр}} \approx \frac{4\pi}{9} \frac{I d_0^4}{\hbar^3 c^4} \left(\omega_1 - \frac{3\hbar}{I} \right)^3 \propto \omega_2^3, \quad (5)$$

а при больших частотах фотонов

$$\sigma_{\text{неупр}} \approx \frac{16\pi}{27} \frac{d_0^4}{I^2 c^4}, \quad \omega_1 \approx \omega_2 \gg \frac{\hbar}{I}. \quad (6)$$

Последнее выражение, как и сечение упругого рассеяния фотона $\sigma_{\text{упр}}$, найденное в предыдущей задаче, не содержит постоянной Планка; при этом полное сечение рассеяния

$$\sigma_{\text{полн}} = \sigma_{\text{упр}} + \sigma_{\text{неупр}} \approx \frac{16\pi}{9} \frac{d_0^4}{I^2 c^4}, \quad \omega \gg \frac{\hbar}{I} \quad (7)$$

совпадает с результатом классической электродинамики для сечения рассеяния электромагнитной волны сферическим ротатором [27, § 78].

14.15. Расчет сечения рассеяния может быть выполнен как и в задаче 14.13. При этом удобно воспользоваться выражением для взаимодействия частицы с полем излучения в виде (XIV. 12). Учитывая вид волновых функций сферического осциллятора, см. 4.4 и 4.5, и то обстоятельство, что для (линейного) осциллятора матричные элементы дипольного момента отличны от нуля лишь для переходов между соседними уровнями, см. (II. 3), замечаем, что все изменение в расчете сечения рассеяния фотона на осцилляторе по сравнению с рассеянием на ротаторе из 14.13 сводится к замене шаровых функций Y_{00} и Y_{1m} на волновые функции осциллятора $\Psi_{n_r l m}$:

$$\Psi_{000} = \frac{2}{(\pi a^6)^{1/4}} e^{-r^2/2a^2} Y_{00}, \quad \Psi_{01m} = \frac{2\sqrt{6}}{(\pi a^{10})^{1/4}} r e^{-r^2/2a^2} Y_{1m},$$

$a^2 = \hbar^2/m\omega_0$, и энергии ротатора E_l на $E_N = \hbar\omega_0(N + 3/2)$. Соответственно матричный элемент дипольного момента для ротатора $d_0 \langle Y_{1m} | \mathbf{n} | Y_{00} \rangle$ следует заменить на

$$\langle 01m | e\mathbf{r} | 000 \rangle = \sqrt{\frac{3}{2}} ea \langle Y_{1m} | \mathbf{n} | Y_{00} \rangle.$$

Как и в случае амплитуды рассеяния фотона на ротаторе во втором порядке теории возмущений, в сумму по промежуточным

состояниям вносит вклад лишь первый возбужденный уровень осциллятора с моментом $l = 1$ и при суммировании по значениям его проекции по-прежнему применим прием, связанный с переходом к суммированию по полной системе собственных функций гамильтониана осциллятора. В результате для дифференциального сечения упругого рассеяния фотона на осцилляторе получаем (вместо формулы (2) из 14.13 в случае ротатора):

$$d\sigma = \frac{e^4}{m^2 c^4} |(\mathbf{e}_2^* \mathbf{e}_1)|^2 \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2} d\Omega. \quad (1)$$

Для рассеяния неполяризованных фотонов после усреднения (суммирования) по поляризациям фотонов, сравнить с 14.12, имеем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{3}{16\pi} (1 + \cos^2 \theta) \sigma(\omega), \quad (2)$$

где полное сечение рассеяния фотона осциллятором

$$\sigma(\omega) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2}. \quad (3)$$

Полученные результаты не содержат постоянной Планка и совпадают с классическими результатами для рассеяния электромагнитных волн осциллятором (сравнить с предыдущей задачей; в связи с этим отметим, что при рассеянии фотона на осцилляторе во втором порядке теории возмущений неупругое рассеяние отсутствует, т. е. возбуждение осциллятора не происходит, в отличие от рассеяния на ротаторе).

14.16. Рассматривая только спиновую степень свободы (т. е. пренебрегая эффектами *отдачи* при рассеянии), считаем, для определенности, частицу локализованной в точке $\mathbf{r} = 0$. Рассчитаем вероятность перехода системы из начального состояния

$$\Psi_i = \chi_2 |1_{k_1 \sigma_1}, 0, \dots\rangle, \quad E_i = \hbar \omega_1$$

в конечное (здесь $\chi_{1,2}$ — соответствующие спиновые функции)

$$\Psi_f = \chi_2 |1_{k_2 \sigma_2}, 0, \dots\rangle, \quad E_f = \hbar \omega_2$$

под влиянием возмущения $\hat{V} = -\hat{\mu} \hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}(0)$, сравнить с 14.7.

Переход происходит во втором порядке теории возмущений и его вероятность рассчитывается по формуле [1, § 43]

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\nu} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_{\nu}} \right|^2 d\rho_f. \quad (1)$$

В данной задаче сумма по промежуточным состояниям $|\nu\rangle$ содержит четыре слагаемых, соответствующих состояниям, описы-

ваемым волновыми функциями (с $s_z = \pm 1/2$):

$$\Psi_{v1} = \chi_{s_z} |0, 0, \dots\rangle, \quad E_{v1} = 0;$$

$$\Psi_{v2} = \chi_{s_z} |1_{k_1\sigma_1}, 1_{k_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle, \quad E_{v2} = 2\hbar\omega,$$

где, как обычно, $\chi_{s_z=+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi_{s_z=-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ и учтено равенство частот (энергий) фотонов: $\omega_1 = \omega_2 = \omega$.

Сумма в выражении (1) принимает вид

$$\frac{2\pi\mu^2c^2}{\omega^2V} \sum_{s_z} \{ \langle \chi_{s_z} | \hat{\sigma} a_2^* | \chi_{s_z} \rangle \langle \chi_{s_z} | \hat{\sigma} a_1 | \chi_1 \rangle - \langle \chi_2 | \hat{\sigma} a_1 | \chi_{s_z} \rangle \langle \chi_{s_z} | \hat{\sigma} a_2^* | \chi_1 \rangle \},$$

где введены обозначения $\mathbf{a}_{1(2)} = [e_{1(2)} \mathbf{k}_{1(2)}]$. Учтя здесь условие полноты, $\sum_{s_z} | \chi_{s_z} \rangle \langle \chi_{s_z} | = 1$, системы спиновых функций χ_{s_z} ,

получаем

$$\sum_v' \frac{V_{fv} V_{vi}}{E_i - E_v} = \frac{2\pi\mu^2c^2}{\omega^2V} a_{2i}^* a_{1k} \langle \chi_2 | \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k - \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i | \chi_1 \rangle =$$

$$= 4\pi i \frac{\mu^2c^2}{\omega^2V} a_{2i}^* a_{1k} e_{ikl} \langle \chi_2 | \hat{\sigma}_l | \chi_1 \rangle$$

(при этом использовано коммутационное соотношение для матриц Паули $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k - \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i = 2i\epsilon_{ikl} \hat{\sigma}_l$). Отсюда, имея в виду соотношения (XIV.6) и (XIV.14), находим дифференциальное сечение рассеяния фотона магнитным моментом

$$d\sigma_{21} = \frac{4\mu^2}{\hbar^2\omega^2} | e_{ikl} a_{2i}^* a_{1k} \chi_2^* \hat{\sigma}_l \chi_1 |^2 d\Omega_2. \quad (2)$$

Выполним в этом выражении усреднение (суммирование) по поляризациям фотонов. Для этого запишем

$$| e_{ikl} a_{2i}^* a_{1k} (\sigma_l)_{21} |^2 = (\sigma_l)_{21} (\sigma_l)_{21}^* e_{ikl} e_{mnl} a_{2i}^* a_{1k} a_{2m} a_{1n}^*.$$

Так как $a_{1k} = \epsilon_{ksp} e_{1s} k_{1p}$, то, воспользовавшись соотношением (XIV.8), получаем

$$\overline{a_{1k} a_{1n}^*} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \epsilon_{ksp} e_{1s} k_{1p} \epsilon_{nuw} e_{1u}^* k_{1w} =$$

$$= \frac{1}{2} k_{1p} k_{1w} \epsilon_{ksp} \epsilon_{nuw} \left(\delta_{su} - \frac{1}{k^2} k_s k_u \right) = \frac{1}{2} \epsilon_{kps} \epsilon_{nws} k_{1p} k_{1w}.$$

Аналогично имеем

$$\sum_{\sigma_2} a_{2i}^* a_{2m} = \epsilon_{ips} \epsilon_{mws} k_{2p} k_{2w}.$$

Теперь можно выполнить интегрирование по углам рассеяния фотона

$$\int \sum_{\sigma_2} a_{2i}^* a_{2m} d\Omega_2 = \varepsilon_{ips} \varepsilon_{mws} \cdot \frac{4\pi}{3} k^2 \delta_{pw} = \frac{8\pi}{3} k^2 \delta_{lm}.$$

В результате описанных преобразований получаем сечение рассеяния неполяризованных фотонов в виде

$$\sigma_{21} = \frac{16\pi}{3} \frac{\mu^4}{\hbar^2 c^2} (\sigma_l)_{21} (\sigma_t)_{21}^* \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{int} \varepsilon_{kps} \varepsilon_{nws} k_{1p} k_{1w},$$

или, учитывая соотношение $\varepsilon_{ikl} \varepsilon_{int} = \delta_{kn} \delta_{lt} - \delta_{kt} \delta_{ln}$,

$$\begin{aligned} \sigma_{21} &= \frac{16\pi}{3} \frac{\mu^4}{\hbar^2 c^2} (\sigma_l)_{21} (\sigma_t)_{21}^* \{ \delta_{lt} k^2 + k_{1t} k_{1l} \} = \\ &= \frac{16\pi}{3} \frac{\mu^4 k^2}{\hbar^2 c^2} \left\{ |\sigma_{21}|^2 + \left| \sigma_{21} \frac{\mathbf{k}}{k} \right|^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Сечение зависит от спинового состояния частицы до и после столкновения. Отметим следующие случаи.

1) Сечение рассеяния из *чистого* спинового состояния с вектором поляризации \mathbf{P} , $|\mathbf{P}| = 1$, без изменения спинового состояния

$$\sigma_{\uparrow\uparrow} = \frac{16\pi}{3} \frac{\mu^4 \omega^2}{\hbar^2 c^4} \left\{ 1 + \left(\mathbf{P} \frac{\mathbf{k}}{k} \right)^2 \right\} = \frac{16\pi}{3} \frac{\mu^4 \omega^2}{\hbar^2 c^4} (1 + \cos^2 \alpha), \quad (4)$$

где α — угол между векторами \mathbf{P} и \mathbf{k} . Как видно, это сечение максимально в случае, когда спин ориентирован вдоль импульса падающих фотонов ($\alpha = 0$ или π).

2) То же, что и в предыдущем случае, но уже с «переворотом» спина, т. е. $\mathbf{P}_f = -\mathbf{P}$:

$$\sigma_{\downarrow\uparrow} = \frac{16\pi}{3} \frac{\mu^4 \omega^2}{\hbar^2 c^4} (2 + \sin^2 \alpha). \quad (5)$$

3) Сечение рассеяния в случае, когда спиновое состояние частицы после столкновения не детектируется,

$$\sigma = \sigma_{\uparrow\uparrow} + \sigma_{\downarrow\uparrow} = \frac{64\pi}{3} \frac{\mu^4 \omega^2}{\hbar^2 c^4}; \quad (6)$$

оно, в отличие от (4), (5), уже не зависит от исходного поляризационного состояния частицы.

Для частицы с произвольным значением s спина имеем $\boldsymbol{\mu} = \mu \mathbf{s}/s$. Читателю предлагается показать, сделав необходимые изменения в приведенном решении задачи, что полное сечение рассеяния фотонов на неполяризованных частицах, просуммиро-

важное по конечным спиновым состояниям фотона и частицы, равно

$$\sigma = \frac{16\pi}{9} \frac{\mu^4 \omega^2}{\hbar^2 c^4} \frac{s+1}{s^3}, \quad (7)$$

что при $s \gg 1$ совпадает с результатом классической электродинамики для сечения рассеяния электромагнитной волны магнитным моментом, усредненного по различным его ориентациям в предположении их эквивалентности:

$$\sigma_{\text{кл}} = \frac{16\pi}{9} \left(\frac{\kappa \mu \omega}{c^2} \right)^2. \quad (8)$$

Здесь κ — гиромагнитное отношение — определяется соотношением $\mu = \kappa \mathbf{M}$, где \mathbf{M} — механический момент частицы.

14.17. Вероятность перехода в системе «атом + фотон» между состояниями

$$\Psi_{i,f} = \Psi_0 | 1_{(k\sigma)_{i,f}}, 0, \dots \rangle, \quad E_{i,f} = E_0 + \hbar\omega$$

(Ψ_0 — волновая функция атома) под влиянием взаимодействия электронов с полем излучения, имеющего в дипольном приближении вид (XIV.12) с $\mathbf{d} = -e \sum \mathbf{r}_a$ (суммирование проводится по всем электронам атома), рассчитывается согласно известной формуле второго приближения теории возмущений

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\nu} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_{\nu}} \right|^2 d\rho_f, \quad (1)$$

см. [1, § 43]; в данном случае $V_{fi} = 0$. Вклад во входящую сюда сумму дают промежуточные состояния двух типов, волновые функции и энергии которых

$$\begin{aligned} \Psi_{\nu 1} &= \Psi_n | 0, 0, \dots \rangle, & E_{\nu 1} &= E_n; \\ \Psi_{\nu 2} &= \Psi_n | 1_{k_1\sigma_1}, 1_{k_2\sigma_2}, 0, \dots \rangle, & E_{\nu 2} &= E_n + 2\hbar\omega \end{aligned}$$

(Ψ_n, E_n — в. ф. и энергии стационарных состояний атома). С учетом соотношений (XIV.12) и (XIV.13) эта сумма принимает вид

$$\frac{2\pi\omega}{V} \sum_n \langle 0 | d_i | n \rangle \langle n | d_k | 0 \rangle \left\{ \frac{e_{2i}^* e_{1k}}{\omega_{0n} + \omega} + \frac{e_{2k}^* e_{1i}}{\omega_{0n} - \omega} \right\}.$$

Содержащиеся здесь две суммы имеют следующую тензорную структуру (ввиду сферической симметрии рассматриваемого

состояния атома Ψ_0 , имеющего равный нулю момент):

$$\sum_n' \frac{\langle 0 | d_i | n \rangle \langle n | d_k | 0 \rangle}{\omega_{0n} \pm \omega} = B(\pm \omega) \delta_{ik}.$$

Выполнив здесь свертку по индексам i и k , получаем

$$B(\pm \omega) = \frac{1}{3} \sum_n' \frac{|\langle n | d | 0 \rangle|^2}{\omega_{0n} \pm \omega}, \quad (2)$$

и так как в условиях задачи $\omega \rightarrow 0$, находим

$$\sum_v' \frac{V_{fv} V_{vi}}{E_i - E_v} \approx \frac{4\pi\omega}{V} B(0) (\mathbf{e}_2^* \mathbf{e}_1).$$

Замечая, что $B(0) = -\frac{1}{2} \hbar \beta_0$ лишь множителем отличается от значения поляризуемости β_0 рассматриваемого состояния атома, и используя соотношения (XIV.6) и (XIV.14), приходим к дифференциальному сечению рассеяния фотона с малой частотой атомом

$$d\sigma = \frac{\beta_0^2 \omega^4}{c^4} |\mathbf{e}_2^* \mathbf{e}_1|^2 d\Omega. \quad (3)$$

После усреднения и суммирования по поляризациям фотонов, сравнить с 14.12, получаем дифференциальное сечение рассеяния неполяризованных фотонов и полное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\beta_0^2 \omega^4}{2c^4} (1 + \cos^2 \theta), \quad \sigma(\omega) = \frac{8\pi}{3} \frac{\beta_0^2 \omega^4}{c^4}. \quad (4)$$

Как иллюстрацию этого соотношения см. рассеяние фотона на ротаторе и осцилляторе в 14.13 и 14.15; поляризуемости этих систем были найдены в 8.10 и 8.2.

Заметим в заключение, что формулы (4) в явном виде не содержат постоянной Планка (в отличие от самих поляризуемостей квантовых систем) и совпадают с аналогичными результатами классической электродинамики для рассеяния электромагнитной волны поляризующейся системой.

14.18. В системе «водородоподобный атом + фотон», находящейся в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi_i = \Psi_0(r) |1_{k\sigma}, 0, \dots\rangle; \quad \Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad E_i = \hbar\omega - \frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2}$$

($a = \hbar^2/Zme^2$), в результате поглощения фотона электроном, происходящего под действием возмущения $\hat{V} = \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}}$

сравнить с (XIV.2), может произойти ионизация атома. Так как в рассматриваемом случае при этом энергия электрона равна $E_f \approx \hbar\omega \gg I = m(Ze^2)^2/2\hbar^2$, т. е. вылетающий электрон является быстрым, то в конечном состоянии можно пренебречь влиянием поля ядра на электрон и выбрать соответствующие волновые функции в виде

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right) |0\rangle_{\nu}, \quad E_f = \frac{p^2}{2m}.$$

Вероятность перехода рассчитывается согласно формуле $d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 d\rho_f$, матричный элемент возмущения в которой описывается выражением (сравнить с (XIV.4))

$$V_{fi} = \frac{e}{mV} \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega a^3}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar + i\mathbf{k}\mathbf{r}} \widehat{\mathbf{p}} e^{-r/a} d^3r. \quad (1)$$

Интеграл здесь легко вычислить, перенеся предварительно действие оператора $\widehat{\mathbf{p}}$ на экспоненту слева от него; после чего он вычисляется в сферических координатах и оказывается равным

$$\frac{8\pi\hbar a^3}{(1+a^2\kappa^2)^2} \kappa \approx \frac{8\pi\hbar^4}{p^4 a} p,$$

где $\kappa = p/\hbar - k$; в последнем равенстве учтено, что $p \gg \hbar k$, как это следует из соотношений

$$\frac{p^2}{2m} \approx \hbar\omega = \hbar ck \ll mc^2$$

(возможность пренебрежения k соответствует замене в матричном элементе $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \approx 1$ в дипольном приближении), и $pa/\hbar \gg 1$ ввиду условия $\hbar\omega \gg I$. Наконец, учитывая выражение для плотности конечных состояний

$$d\rho_f = \int \delta\left(\hbar\omega - I - \frac{p^2}{2m}\right) \frac{V p dp^2 d\Omega}{2(2\pi\hbar)^3} = \frac{mpV}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega$$

и связь (XIV.14) сечения с вероятностью процесса, находим дифференциальное сечение фотоэффекта

$$d\sigma = 32 \frac{e^2 \hbar}{mc} \frac{I^{5/2}}{(\hbar\omega)^{7/2}} \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\mathbf{p}}{p} \right|^2 d\Omega. \quad (2)$$

Выполнив в нем усреднение по поляризациям фотона с помощью соотношения (XIV.8), что дает $|\overline{\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{p}}|^2 = \frac{1}{2} p^2 \sin^2 \theta$ (θ — угол между векторами \mathbf{p} и \mathbf{k}), получаем дифференциальное

сечение фотоэффекта для неполяризованных фотонов

$$d\sigma = 32Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right)^2 \left(\frac{I_0}{\hbar\omega} \right)^{7/2} \sin^2 \theta d\Omega. \quad (3)$$

Заметим, что преимущественный вылет электронов перпендикулярно импульсу фотона отражает «преобладание» в нерелятивистском случае волновых свойств фотона: именно в этом направлении действует на электрон сила Лоренца со стороны электромагнитной волны. В релятивистском случае, для более жестких фотонов, начинают проявляться их корпускулярные свойства, что приводит к преимущественному вылету электронов в направлении импульса фотона, см. [29].

Интегрирование выражения (3) по углам дает полное сечение фотоэффекта

$$\sigma(\omega) = \frac{256\pi}{3} Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right)^2 \left(\frac{I_0}{\hbar\omega} \right)^{7/2}, \quad (4)$$

где $I_0 = I/Z^2 = 13,6$ эВ — потенциал ионизации атома водорода. Заметим, что сечение (4) для значений $Z = 1$ и $\hbar\omega = 5$ кэВ составляет $\approx 6 \cdot 10^{-26}$ см².

Выражение (4), умноженное на 2 (два *K*-электрона), можно использовать и для (приближенного) вычисления сечения фотоэффекта на атомах, отличных от водородоподобного. Вклад в сечение других электронов атома, находящихся в возбужденных состояниях, меньше, чем *K*-электронов: они более слабо связаны с ядром, а в пределе свободных электронов поглощения ими фотонов не происходит. Оценка сечения фотоэффекта на таких электронах атома может быть выполнена аналогично тому, как это сделано в следующей задаче 14.19 для процесса радиационной рекомбинации электрона.

14.19. Решение данной задачи может быть получено в результате простых замен в решении предыдущей задачи (заметим, что общее соотношение между сечениями взаимно обратных процессов фотоэффекта и радиационной рекомбинации электрона непосредственно следует из принципа детального равновесия, см. 13.93). Перестановка начального и конечного состояний не изменяет значения $|V_{fi}|^2$ в силу эрмитовости оператора \mathcal{V} . Следует произвести следующие изменения:

1) в выражении для плотности конечных состояний, теперь dp_f описывается формулой (XIV.6) с $\hbar\omega = \epsilon_e + I \approx \epsilon_e$;

2) в соотношении (XIV.14), связывающем вероятность и сечение, в данной задаче $d\sigma = V d\omega/v_e$;

3) заменить усреднение по поляризациям фотона суммированием по ним, что дает дополнительный множитель 2 в сечении процесса.

В результате указанных замен приходим к следующим выражениям для дифференциального и полного сечений радиационной рекомбинации быстрого электрона на основной уровень соответствующего водородоподобного атома (иона):

$$\begin{aligned} d\sigma_{\text{рек, } 1s} &= 16Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^2 \left(\frac{I_0}{e_e}\right)^{5/2} \sin^2 \theta d\Omega, \\ \sigma_{\text{рек, } 1s} &= \frac{128\pi}{3} Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^2 \left(\frac{I_0}{e_e}\right)^{5/2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Отметим, что рекомбинация быстрого электрона на возбужденные уровни атома имеет значительно меньшие сечения. Действительно, из формулы (1) предыдущей задачи следует, что $V_{fi} \propto e\mathbf{r} \Phi_i(\mathbf{p})$, где $\Phi_i(\mathbf{p})$ — волновая функция рассматриваемого состояния электрона в водородоподобном атоме в импульсном представлении. Для ns -состояний асимптотика этой в. ф. при больших импульсах имеет вид $\Phi_{ns} \approx C/\sqrt{n^3} p^4$, так что ³⁾ $\sigma_{\text{рек, } ns} \propto 1/n^3$ (для состояний с орбитальным моментом $l \neq 0$ в. ф. $\Phi_{nl}(\mathbf{p})$, а соответственно и сечение рекомбинации убывает при $p \rightarrow \infty$ еще более быстро, чем в случае s -состояний, см. 4.18). Поэтому учет рекомбинации на возбужденные уровни сводится к умножению сечений (1) на $\sum_n n^{-3} = \zeta(3) = 1,202$ ($\zeta(s)$ — дзета-функция Римана), т. е. увеличивает сечение рекомбинации всего на 20 %.

14.20. Процесс фоторасщепления дейтрона по своей физической природе аналогичен фотоэффекту и расчет сечения его дублирует решение задачи 14.18. Укажем изменения, которые следует произвести в формулах этой задачи применительно к данной.

Под волновой функцией $\Psi_0(r)$ теперь следует понимать в. ф. дейтрона, имеющую в приближении потенциала нулевого радиуса действия сил вид

$$\Psi_0(r) = C_{\kappa 0} \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad \varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{M}. \quad (1)$$

Здесь ε_0 — энергия связи дейтрона (M — масса нуклона, $\mu = M/2$ — приведенная масса рп-системы) и соответственно $E_i = \hbar\omega - \varepsilon_0$. Заметим, что в волновую функцию (1) введен асимптотический коэффициент $C_{\kappa 0}$, учитывающий поправку на конечность радиуса взаимодействия; см. по этому поводу 12.1, а также 11.36.

³⁾ Такую же зависимость, $\sigma_{ns} \propto n^{-3}$, имеет сечение фотоэффекта из возбужденного ns -состояния водородоподобного атома.

Во взаимодействии (протона) с полем излучения следует произвести замены: $e \rightarrow -e$, $m \rightarrow M$, $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_p = \mathbf{r}/2$.

Вид волновых функций конечных состояний Ψ_f не изменяется, но теперь $E_f = p^2/M$.

Соответственно изменяется и значение интеграла в матричном элементе возмущения (см. формулу (1) из 14.18); теперь он равен

$$\int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \frac{e^{-\kappa r}}{r} d^3r = \frac{4\pi\hbar^2}{(p^2 + \hbar^2\kappa^2)} \mathbf{p} \quad (2)$$

(слагаемое $i\kappa r/2$ в показателе экспоненты опущено по указанной в 14.18 причине).

Плотность конечных состояний в условиях данной задачи

$$d\rho_f = \int \delta\left(\hbar\omega - \epsilon_0 - \frac{p^2}{M}\right) \frac{V d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{MpV d\Omega}{2(2\pi\hbar)^3},$$

$$p = \sqrt{M(\hbar\omega - \epsilon_0)}.$$

Учитывая сказанное, приходим к следующему выражению для дифференциального сечения фоторасщепления дейтрона:

$$d\sigma = 2 \frac{e^2}{\hbar c} C_{\kappa 0}^2 \frac{p \sqrt{\epsilon_0}}{\hbar M^{5/2} \omega^3} |\mathbf{e}\mathbf{p}|^2 d\Omega. \quad (3)$$

После усреднения по поляризациям фотонов (сравнить с 14.18) получаем

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c} C_{\kappa 0}^2 \frac{p^3 \sqrt{\epsilon_0}}{\hbar M^{5/2} \omega^3} \sin^2 \theta d\Omega. \quad (4)$$

Интегрирование по углам дает полное сечение фоторасщепления дейтрона

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \frac{e^2}{\hbar c} C_{\kappa 0}^2 \frac{\sqrt{\epsilon_0} (\hbar\omega - \epsilon_0)^{3/2}}{M\hbar\omega^3}. \quad (5)$$

Сделаем заключительное замечание в отношении области применимости полученных результатов. Они основаны фактически на использовании приближения нулевого радиуса для потенциала рп-взаимодействия. Такое рассмотрение предполагает, что в задаче существенны расстояния, много большие радиуса действия ядерных сил. Как видно из выражения (2), оно оправдано при $p \sim \hbar\kappa$, т. е. таких частотах фотонов, что $\hbar\omega \sim \epsilon_0$ (и неприменимо при значениях импульсов «освобождающихся» нуклонов $p \geq \hbar/r_0$, где r_0 — радиус ядерного взаимодействия; при больших импульсах из-за быстрых осцилляций экспоненты в интеграле (2) существенны малые расстояния, на которых уже важен вид точной волновой функции дейтрона).

14.21. В тормозном излучении быстрого электрона начальное состояние системы — свободный электрон и вакуум фотонов — описывается волновой функцией

$$\Psi_i = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \mathbf{r}\right) |0\rangle_{\nu}, \quad E_i = \frac{1}{2m} p_1^2.$$

Рассеяние электрона, сопровождающееся излучением одного фотона, происходит под влиянием возмущения

$$\hat{V} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}}, \quad (1)$$

сравнить с (XIV.2) (слагаемое $\propto \hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}}^2$ опущено, так как оно отвечает за переходы с четным изменением числа фотонов). Для конечных состояний

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_2 \mathbf{r}\right) |1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots\rangle, \quad E_f = \frac{1}{2m} p_2^2 + \hbar\omega.$$

Вероятность рассматриваемого перехода, происходящего во втором порядке теории возмущений, рассчитывается по формуле [1, § 43]

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\nu}' \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_{\nu}} \right|^2 d\rho_f \quad (2)$$

Отметим, что матричный элемент возмущения V_{fi} отличен от нуля уже в первом порядке за счет второго слагаемого в возмущении (1). Однако он содержит множитель $\delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 + \hbar\mathbf{k}}$, выражающий сохранение импульса при излучении фотона свободным электроном, что совместно с законом сохранения энергии приводит к невозможности излучения фотона свободным электроном. Поэтому взаимодействие с внешним полем, приводящее к передаче импульса ядру, является существенным элементом рассматриваемого процесса.

Промежуточные состояния $|\nu\rangle$ в сумме (2), дающие отличный от нуля вклад, описываются волновыми функциями двух типов:

$$\begin{aligned} \Psi_{\nu 1} &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{xr}} |1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots\rangle, & E_{\nu 1} &= \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} + \hbar\omega; \\ \Psi_{\nu 2} &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{xr}} |0\rangle_{\nu}, & E_{\nu 2} &= \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}, \end{aligned} \quad (3)$$

при этом суммирование по $\nu_{1,2}$ сводится к сумме по всем возможным значениям волнового вектора κ электрона в промежуточном состоянии.

Используя явный вид волновых функций и оператора $\mathbf{A}_{\text{rad}}(\mathbf{r})$, см. (XIV.1), находим матричные элементы возмущения входящие в выражение (2),

$$\begin{aligned}
 V_{\nu 1 i} &= \frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} \hat{\mathbf{p}})_{\nu 1 i} = \\
 &= \frac{e}{mV} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega V}} \mathbf{e}_{k\sigma}^* \int e^{-i(\mathbf{x}+\mathbf{k})\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} dV = \\
 &= \frac{e\hbar}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega V}} (\mathbf{e}_{k\sigma}^* \mathbf{k}_1) \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{x}+\mathbf{k}}; \\
 V_{f\nu 2} &= \frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{A}}_{\text{rad}} \hat{\mathbf{p}})_{f\nu 2} = \frac{e\hbar}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega V}} (\mathbf{e}_{k\sigma}^* \mathbf{x}) \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{k}_2+\mathbf{k}}; \\
 V_{\nu 2 i} &= -Ze^2 \left(\frac{1}{r}\right)_{\nu 2 i} = -\frac{Ze^2}{V} \int \frac{1}{r} e^{i(\mathbf{k}_1-\mathbf{x})\mathbf{r}} dV = -\frac{4\pi Ze^2}{(\mathbf{k}_1-\mathbf{x})^2 V}; \\
 V_{f\nu 1} &= -Ze^2 \left(\frac{1}{r}\right)_{f\nu 1} = -\frac{4\pi Ze^2}{(\mathbf{x}-\mathbf{k}_2)^2 V}, \quad \mathbf{p}_{1,2} = \hbar \mathbf{k}_{1,2}
 \end{aligned}$$

Наличие в них множителей вида $\delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{x}+\mathbf{k}}$ позволяет сразу выполнить суммирование по ν в выражении (2) (в сумме по состояниям $\nu 1$ отлично от нуля лишь одно слагаемое с $\mathbf{x} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}$, а для состояний $\nu 2$ — лишь с $\mathbf{x} = \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}$) и получить

$$\sum_{\nu} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_{\nu}} = \frac{4\pi Ze^2}{\hbar \omega q^2} \frac{e\hbar}{mV} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega V}} \mathbf{e}_{k\sigma}^* (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2), \quad (4)$$

где $\hbar \mathbf{q} = \hbar(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) \approx \hbar(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ — импульс, переданный ядру. При этом пренебрежено импульсом фотона $\hbar k$ по сравнению с импульсами электронов $\hbar k_{1,2}$ (это оправдано для нерелятивистских электронов и соответствует, фактически, использованию дипольного приближения при излучении фотона, сравнить с 14.18), так что энергетические знаменатели оказываются равными $-\hbar\omega$ и $\hbar\omega$ соответственно для состояний $\nu 1$ и $\nu 2$.

Наконец, учитывая, что плотность конечных состояний для рассматриваемого процесса равна

$$\begin{aligned}
 d\rho_f &= \int \delta(E_f - E_i) \frac{V d^3 k_2}{(2\pi)^3} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} = \\
 &= \int \delta\left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}\right) \frac{V \omega^2 k_2 m}{(2\pi)^6 \hbar^2 c^3} d\Omega_{\nu} d\Omega_2 d\omega d\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = \\
 &= \frac{mV^2 k_2 \omega^2}{(2\pi)^6 \hbar^2 c^3} d\Omega_{\nu} d\Omega_2 d\omega, \quad k_2 = \sqrt{k_1^2 - 2m\omega/\hbar},
 \end{aligned}$$

и связь (XIV. 14) сечения и вероятности процесса, находим дифференциальное сечение тормозного излучения

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(Ze^2)^2 k_2}{\pi^2 \hbar^2 c^2 k_1 \omega q^4} \left| e_{\mathbf{k}\sigma}^* \mathbf{q} \right|^2 d\Omega_{\mathbf{v}} d\Omega_2 d\omega. \quad (5)$$

Эта формула дает наиболее полную информацию о процессе тормозного излучения. Интересуясь лишь спектральным составом тормозного излучения, сделаем следующие преобразования.

Прежде всего выполним в выражении (5) суммирование по двум независимым поляризациям фотона с помощью соотношения (XIV. 8), что дает

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(Ze^2)^2 k_2}{\pi^2 \hbar^2 c^2 k_1 \omega q^2} \left(1 - \frac{(\mathbf{q}\mathbf{k})^2}{q^2 k^2} \right) d\Omega_{\mathbf{v}} d\Omega_2 d\omega. \quad (6)$$

Теперь выполним интегрирование по направлениям вылета излучаемых фотонов (оно проводится элементарно, если выбрать полярную ось вдоль вектора \mathbf{q} , при этом $d\sigma \propto \sin^2 \theta_{\mathbf{v}} d\Omega_{\mathbf{v}}$):

$$d\sigma = \frac{8}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(Ze^2)^2}{\pi \hbar^2 c^2 k_1} \frac{k_2}{\omega q^2} d\Omega_2 d\omega. \quad (7)$$

Наконец, выполнив интегрирование по углам вылета рассеянных электронов, которое проводится элементарно, если выбрать полярную ось вдоль вектора \mathbf{k}_1 (при этом $q^2 = k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 \cos \theta_2$), находим дифференциальное сечение тормозного излучения как функцию частоты излучаемых фотонов (т. е. спектральное распределение фотонов):

$$d\sigma_{\omega} = \frac{8}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(Ze^2)^2}{mc^2 E} \frac{1}{\omega} \ln \frac{(\sqrt{E} + \sqrt{E - \hbar\omega})^2}{\hbar\omega} d\omega, \quad (8)$$

здесь E — начальная энергия электрона.

Так как $d\sigma/d\omega \propto 1/\omega$ при $\omega \rightarrow 0$, то полное сечение тормозного излучения бесконечно (это — так называемая *инфракрасная катастрофа*). Однако эта расходимость сечения несущественна при вычислении потери энергии электроном на излучение, характеризуемой «эффективным торможением», или «эффективным излучением» $\kappa = \int \hbar\omega d\sigma_{\omega}$; используя (8), нетрудно получить

$$\kappa = \hbar \int_0^E \omega d\sigma_{\omega} = \frac{16}{3} Z^2 \frac{e^2}{\hbar c} mc^2 r_e^2, \quad (9)$$

где $r_e = e^2/mc^2$ — классический радиус электрона.

В заключение подчеркнем, что так как при решении задачи действие поля ядра рассматривалось как возмущение, то применимость полученных результатов (5)–(8) требует выполнения

условий $Ze^2/\hbar v_{1,2} \ll 1$ (электрон должен быть быстрым как в начальном, так и в конечном состояниях). Поэтому они неприменимы, если почти вся энергия налетающего электрона передается излучаемому фотону. Однако формула (9) справедлива при выполнении лишь одного условия, $Ze^2/\hbar v_1 \ll 1$, так как вклад области интегрирования, примыкающей к верхнему пределу, где неприменимо выражение (8), не играет существенной роли в значении интеграла (9) в целом.

Наконец, укажем обобщение выражения (8) на случай тормозного излучения при столкновении двух частиц с зарядами и массами e_1, m_1 и e_2, m_2 в случае их чисто электростатического взаимодействия. Как нетрудно сообразить, оно получается из формулы (8) с помощью замен $-Ze^2 \rightarrow e_1 e_2, \frac{e}{m} \rightarrow \frac{e_1}{m_1} - \frac{e_2}{m_2}$ и имеет вид

$$d\sigma_\omega = \frac{8}{3} e_1^2 e_2^2 \left(\frac{e_1}{m_1} - \frac{e_2}{m_2} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar c^3 E} \frac{1}{\omega} \ln \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E - \hbar\omega})^2}{\hbar\omega} d\omega, \quad (10)$$

где μ — приведенная масса частиц (при этом $E = \mu v^2/2$, v — относительная скорость сталкивающихся частиц).

Г л а в а 15

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ВОЛНОВЫЕ УРАВНЕНИЯ

15.1. Общее решение уравнения Клейна — Гордона (XV. 1) можно представить в виде суперпозиции

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^+(\mathbf{r}, t) + \Psi^-(\mathbf{r}, t),$$

$$\Psi^\pm(\mathbf{r}, t) = \int a^\pm(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}}^\pm(\mathbf{r}, t) d^3k \quad (1)$$

частных решений этого уравнения, образующих полную систему:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^\pm = e^{\pm i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(k)t)}, \quad \omega(k) = \sqrt{k^2 c^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2} > 0 \quad (2)$$

(обращаем внимание на используемое обозначение в. ф. $\Psi_{\mathbf{k}}^\pm$).

Функция $\Psi_{\mathbf{k}}^+$ описывает частицу, имеющую импульс $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и энергию $\varepsilon = \hbar\omega \geq mc^2$. Функция $\Psi_{\mathbf{k}}^-$ формально отвечает состоянию частицы с энергией $\varepsilon' = -\hbar\omega \leq -mc^2$ и импульсом $-\hbar\mathbf{k}$. Такое решение уравнения после выполнения операции зарядового сопряжения сопоставляется уже состоянию античастицы, имеющей энергию $\varepsilon = \hbar\omega \geq mc^2$ и импульс $\hbar\mathbf{k}$, см. 15.2. В связи с этим подчеркнем, что общее решение (1) уравнения

Клейна — Гордона имеет лишь формальный смысл, так как оно не описывает никакого одночастичного состояния. Одночастичные состояния описываются лишь функциями $\Psi^+(\mathbf{r}, t)$ и $\Psi^-(\mathbf{r}, t)$ в отдельности.

Ограничиваясь в выражении (1) суперпозициями Ψ^+ и Ψ^- по отдельности, подставим их в выражение для Q , приведенное в условии задачи. Элементарное интегрирование с использованием формулы

$$\int e^{\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d^3r = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$$

приводит к следующему соотношению:

$$Q^\pm = \pm (2\pi)^3 \frac{\hbar}{mc^2} \int \omega(\mathbf{k}) |a^\pm(\mathbf{k})|^2 d^3k. \quad (3)$$

Как видно, Q^\pm действительно имеют определенный, но разный для функций Ψ^\pm знак. Однако подынтегральные выражения $\rho^\pm(\mathbf{r}, t)$ в координатном представлении для Q^\pm таким свойством, вообще говоря, не обладают (т. е. не являются знакоопределенными), так что ρ^+ , как и ρ^- , нельзя интерпретировать как плотность вероятности.

В случае заряженных частиц величинам ρ^\pm можно дать наглядную интерпретацию, связав их с объемной плотностью заряда. Для частицы, имеющей заряд e , выражение $e\rho^+(\mathbf{r}, t)$ при нормировке $Q^+ = 1$ можно рассматривать как плотность заряда в соответствующем одночастичном состоянии. Величина $e\rho^-$ описывает плотность заряда в соответствующем состоянии античастицы, при этом нормировка $Q^- = -1$ автоматически обеспечивает противоположные знаки зарядов частицы и соответствующей ей античастицы.

Для нейтральных частиц наглядная интерпретация локальных величин $\rho^\pm(\mathbf{r}, t)$, вообще говоря, невозможна. Однако это обстоятельство не следует рассматривать как порок теории, так как локальные пространственные характеристики в релятивистской области, как это отмечалось во вводных замечаниях к главе, лишены глубокого физического смысла. По этой причине в релятивистских теориях физический смысл волновой функции частицы как амплитуды вероятности сохраняется лишь в импульсном (но не в координатном!) представлении, сравнить с 15.7.

15.2. Инвариантность уравнения Клейна — Гордона для свободной частицы

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \Psi(\mathbf{r}, t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

относительно зарядового сопряжения \mathcal{C} означает, что если $\Psi(\mathbf{r}, t)$ является решением уравнения (1), то функция $\Psi_c = \mathcal{C}\Psi$

также является решением этого уравнения, т. е. Ψ и Ψ_c удовлетворяют одному и тому же уравнению.

Произведя в (1) комплексное сопряжение, очевидным образом убеждаемся в рассматриваемой инвариантности уравнения.

Так как оператор \hat{C} удовлетворяет соотношению $\hat{C}^2 = 1$, то в соответствии с условием задачи общее решение уравнения Клейна — Гордона, см. формулы (1) и (2) предыдущей задачи, можно записать в виде

$$\Psi = \Psi^+(\mathbf{r}, t) + \Psi^-(\mathbf{r}, t) = \Psi^+(\mathbf{r}, t) + \hat{C}\Psi_c^+(\mathbf{r}, t). \quad (2)$$

Аналогично для решения зарядово-сопряженного уравнения имеем

$$\Psi_c = \Psi_c^+ + \Psi_c^- = \Psi_c^+ + \hat{C}\Psi^+. \quad (3)$$

Общие решения рассматриваемых уравнений включают в себя как волновую функцию частицы Ψ^+ , так и в. ф. Ψ_c^+ соответствующей ей античастицы и имеют лишь формальный смысл (так как преобразование \hat{C} является *антилинейным*, то рассматривать соотношения (2) и (3) в духе обычного квантовомеханического принципа суперпозиции не имеет глубокого смысла). Физически реализуемые одночастичные состояния частицы или античастицы описываются лишь суперпозициями частных решений с частотами (энергиями) одного и того же знака.

Отметим, что физический смысл преобразования \hat{C} как зарядового сопряжения для бесспиновых частиц наглядно проявляется при рассмотрении не свободных, а заряженных частиц, находящихся во внешнем электромагнитном поле, которое по-разному действует на частицы и античастицы, см. 15.3.

Так как $\Psi_c = \hat{C}\Psi = \Psi^*$, то уравнение $\hat{f}\Psi_f = f\Psi_f$ на с. ф. и с. з. оператора \hat{f} при зарядовом сопряжении принимает вид $\hat{f}^*(\Psi_f)_c = f(\Psi_f)_c$. Отсюда следует, что если $\hat{f}^* = \hat{f}$, то зарядово-сопряженная с. ф. $(\Psi_f)_c = \Psi_f^*$ также является с. ф. оператора \hat{f} , отвечающей тому же самому с. з. f . Если же $\hat{f}^* = -\hat{f}$, то $(\Psi_f)_c$ тоже является с. ф., но отвечает уже с. з., равному $-f$. Соответственно с. ф. операторов $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, $\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$, $\hat{e} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ при зарядовом сопряжении «изменяют» с. з. на противоположное по знаку, а с. ф. оператора $\hat{1}^2$ при этом «сохраняет» свое с. з.

15.3. а) Так как $\Psi_c = \hat{C}\Psi = \Psi^*$, то замечаем, что уравнение Клейна — Гордона для частицы с зарядом e во внешнем

$$\left\{ c^2 \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right)^2 \Psi \quad (1)$$

после выполнения в нем комплексного сопряжения принимает вид

$$\left\{ c^2 \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi_c = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\varphi \right)^2 \Psi_c, \quad (2)$$

что также представляет уравнение Клейна — Гордона, но уже для частицы с зарядом $-e$ и такой же массой m , как в исходном уравнении (1), причем в том же электромагнитном поле.

б) Совершив в (1) одновременно с преобразованием зарядового сопряжения волновой функции также преобразование потенциалов $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}_c = -\mathbf{A}$ и $\varphi \rightarrow \varphi_c = -\varphi$, приходим к уравнению

$$\left\{ c^2 \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}_c \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi_c = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi_c \right)^2 \Psi_c, \quad (3)$$

имеющему такой же вид, как и исходное уравнение (1).

в) Чтобы дать интерпретацию установленным выше закономерностям, рассмотрим постоянное электромагнитное поле (потенциалы \mathbf{A} , φ не зависят от времени). В этом случае уравнение (1) имеет «стационарные» решения вида $\Psi_\varepsilon = e^{-i\varepsilon t/\hbar} \psi_\varepsilon(\mathbf{r})$. Все такие решения можно разбить на две группы, Ψ_ε^+ и Ψ_ε^- , в зависимости от того, в какие состояния свободной частицы, с $\varepsilon \geq mc^2$ или с $\varepsilon \leq -mc^2$, они переходят при адиабатическом выключении внешнего поля¹⁾. Решения Ψ_ε^+ , переходящие при выключении поля в состояния верхнего континуума, имеют смысл волновой функции состояния частицы с энергией ε в рассматриваемом электромагнитном поле. Решения Ψ_ε^- ассоциируются с состояниями античастицы. При этом, как и в случае отсутствия внешнего поля, волновой функцией античастицы является

$$\Psi_c^+ = \hat{C} \Psi_\varepsilon^- = (\Psi_\varepsilon^-)^*, \quad (4)$$

а энергия античастицы в рассматриваемом состоянии равна $-\varepsilon$.

¹⁾ Заметим, что такая классификация решений имеет смысл лишь в случае не очень сильных внешних полей, пока нижняя граница энергетического спектра состояний Ψ_ε^+ лежит выше верхней границы спектра состояний Ψ_ε^- . В сильных полях, когда эти границы «сливаются», одночастичная задача теряет смысл: становится возможным спонтанное рождение пар частица — античастица; см. по этому поводу задачи 15.12 и 15.13.

Таким образом, общее решение уравнения Клейна — Гордона (1) для частицы в электромагнитном поле представляется, как и в случае свободной частицы, в виде (сравнить с 15.2)

$$\Psi = \Psi^+ + \Psi^- = \Psi^+ + \hat{C}\Psi_c^+.$$

При этом волновая функция Ψ_c^+ античастицы имеет «правильную» временную зависимость и удовлетворяет уравнению Клейна — Гордона (2) для частицы с зарядом $-e$, противоположным заряду той частицы, волновой функцией которой является Ψ^+ .

Во избежание недоразумений подчеркнем, что оба уравнения, (1) и (2), несут в себе одинаковую физическую информацию, так как решения каждого из них включают описание состояний как частицы, так и соответствующей ей античастицы (это замечание справедливо и в случае внешних полей любой природы). Однако описание состояний частицы и античастицы в каждом из уравнений является «несимметричным», так как одни представлены непосредственно их волновыми функциями, а для других переход к волновой функции требует выполнения зарядового сопряжения соответствующего решения уравнения.

Данная выше интерпретация преобразования \hat{C} как зарядового сопряжения, осуществляющего переход от «нефизических» состояний частицы к «физическим» состояниям соответствующей ей античастицы, основана на результате п. а) решения. В этом смысле инвариантность уравнения Клейна — Гордона, установленная в п. б), отражает *зарядовую симметрию* описываемых им закономерностей: любому физическому состоянию частицы, описываемому волновой функцией $\Psi^+(\mathbf{r}, t)$, соответствует точно такое же состояние античастицы с в. ф. $\Psi_c^+(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi^+(\mathbf{r}, t)$. При этом существенно, что при переходе к античастице у потенциалов внешнего электромагнитного поля следует изменить знак, что согласуется с физическим смыслом зарядового сопряжения (сравнить с результатом задачи 15.4).

15.4. Так как оператор зарядового сопряжения \hat{C} для бесспиновых частиц дается формулой $\Psi_c = \hat{C}\Psi \equiv \Psi^*$ (см. 15.2 и 15.3) и $U(\mathbf{r}, t)$ является вещественной функцией (что является аналогом вещественности потенциала и эрмитовости гамильтониана в нерелятивистском случае), то, совершая в уравнении

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4 + 2mc^2 U) \Psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi \quad (1)$$

комплексное сопряжение, получаем точно такое же уравнение для зарядово-сопряженной функции:

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4 + 2mc^2 U) \Psi_c = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi_c, \quad (2)$$

что и доказывает инвариантность уравнения Клейна — Гордона для частицы в скалярном поле относительно зарядового сопряжения.

Сделаем несколько замечаний. Уравнения (1) и (2) имеют одинаковый вид, но только первое из них (точнее, положительно-частотная часть его решений) непосредственно описывает частицу, а второе — соответствующую ей античастицу, см. более подробное обсуждение этого вопроса в предыдущей задаче. Поэтому если волновая функция $\Psi^+(\mathbf{r}, t)$, являющаяся решением уравнения (1), описывает некоторое физически реализуемое состояние частицы в поле U , то точно такое же состояние с в. ф. $\Psi_c^+ = \Psi^+$ возможно и для античастицы в том же поле. Это указывает на одинаковый характер воздействия скалярного поля на частицу и соответствующую ей античастицу²⁾ и является отражением зарядовой симметрии уравнений (1) и (2) (сравнить с заряженной частицей в электромагнитном поле, где для обеспечения зарядовой симметрии требуется изменить знаки потенциалов на противоположные, см. 15.3).

15.5. Внутренняя четность бесспиновой частицы определяется характером преобразования ее волновой функции при отражении координат $P\Psi(\mathbf{r}, t) = \pm\Psi(-\mathbf{r}, t)$, и равна $+1$ и -1 соответственно для скалярной и псевдоскалярной функций.

Как отмечалось в 15.2 и 15.3, волновые функции частицы и соответствующей ей античастицы связаны с различными частными решениями уравнения Клейна — Гордона для одной и той же (скалярной или псевдоскалярной) функции $\Psi(\mathbf{r}, t)$, которую можно записать в виде

$$\Psi = \Psi^+ + \Psi^- = \Psi^+ + \hat{C}\Psi_c^+, \quad (1)$$

при этом $\Psi_c^+ = \hat{C}\Psi^- = (\Psi^-)^*$. Функции Ψ^+ и Ψ_c^+ являются волновыми функциями состояний частицы и античастицы соответственно.

Так как функции Ψ^+ и Ψ^- имеют одинаковый характер по отношению к инверсии координат (т. е. обе являются либо скалярными, либо псевдоскалярными функциями) и он не изменяется при комплексном сопряжении, то отсюда вытекает, что функции Ψ^+ и Ψ_c^+ также имеют одинаковый характер относительно отражения координат, что и доказывает одинаковое значение внутренних четностей бесспиновой частицы и соответствующей ей античастицы.

²⁾ Сравнить с одинаковым действием на частицу и античастицу гравитационного поля.

Сделаем несколько заключительных замечаний. В нерелятивистском случае при взаимодействии частиц число их (каждого вида) не изменяется, и поэтому внутренняя четность всех частиц системы на разных стадиях процесса одна и та же и не является экспериментально наблюдаемой величиной. Соответственно невозможно различить характер волновой функции относительно отражения координат и из соображений простоты полагают, что она является скалярной. В релятивистском случае внутренние четности бозонов могут быть, в принципе, определены из закона сохранения четности ввиду возможности процессов рождения и поглощения бозонов поодиночке (сравнить, например, с 10.5 и 10.6). Наконец, отметим, что для частиц произвольного спина внутренние четности частицы и античастицы одинаковы для бозонов и противоположны по знаку для фермионов.

15.6. В нерелятивистской квантовой механике условие ортогональности собственных функций эрмитова оператора \hat{f} определяется соотношением

$$\int \Psi_{f'}^*(\mathbf{r}) \Psi_f(\mathbf{r}) dV = \delta(f - f') \quad (\text{или } \delta_{f'f} \text{ для д. с.}), \quad (1)$$

вид которого тесно связан с сохранением во времени нормировки волновой функции состояния частицы $\int |\Psi|^2 dV = \text{const} = 1$, непосредственно следующим из уравнения Шрёдингера.

В случае уравнения Клейна — Гордона (XV.1) во времени сохраняется величина

$$Q = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi - \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi \right)^* \Psi \right\} dV. \quad (2)$$

Именно это выражение должно использоваться для нормировки в. ф. состояния и определять структуру интеграла, выражающего условие ортогональности собственных функций (обобщение формулы (1) на релятивистский случай).

Запишем в. ф. $\Psi_{\mathbf{p}, \varepsilon}$, являющиеся решением уравнения (XV.1), в виде (сравнить с 15.1)

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{\pm} = C^{\pm}(\mathbf{p}) \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)\right), \quad (3)$$

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \geq mc^2.$$

При этом $\Psi_{\mathbf{p}}^+$ описывает состояние частицы с импульсом \mathbf{p} и энергией ε , а плоская волна $\Psi_{\mathbf{p}}^-$ отвечает формально импульсу $-\mathbf{p}$ и энергии $-\varepsilon$. Такое решение уравнения Клейна — Гордона

сопоставляется античастице уже с импульсом \mathbf{p} и энергией ε , см. 15.2. Подставив в интеграл (2) вместо функций Ψ и Ψ^* соответственно в. ф. $\Psi_{\mathbf{p}}^{\pm}$ и $\Psi_{\mathbf{p}'}^{\pm*}$, убеждаемся в том, что он равен нулю в случае выбора в нем функций с разными знаками частоты и пропорционален $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ для функций одного и того же вида. Выбрав в выражении (3) значения

$$C^{\pm}(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3 \varepsilon(\mathbf{p})}},$$

получаем условие ортонормированности рассматриваемой системы функций в виде

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi_{\mathbf{p}'}^{\pm*} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{p}}^{\pm} - \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{p}'}^{\pm*} \right) \Psi_{\mathbf{p}}^{\pm} \right\} dV &= \pm \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \\ \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi_{\mathbf{p}'}^{\pm*} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{p}}^{\mp} - \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{p}'}^{\pm*} \right) \Psi_{\mathbf{p}}^{\mp} \right\} dV &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

представляющем обобщение формулы (1) на релятивистский случай.

15.7. Записав положительно-частотное решение $\Psi^+(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона (XV.1), описывающее физическое состояние частицы, в виде суперпозиции плоских волн $\Psi_{\mathbf{p}}^+(\mathbf{r}, t)$ (см. формулу (3) предыдущей задачи с указанным в ней значением коэффициента $C^+(\mathbf{p})$):

$$\begin{aligned} \Psi^+(\mathbf{r}, t) &= \int a^+(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}}^+(\mathbf{r}, t) d^3p = \\ &= \int \sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3 \varepsilon(\mathbf{p})}} a^+(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)} d^3p, \end{aligned} \quad (1)$$

получаем для сохраняющейся во времени величины Q^+ выражение (сравнить с 15.1)

$$\begin{aligned} Q^+ &= \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi^{+*} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ - \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ \right)^* \Psi^+ \right\} dV = \\ &= \int |a^+(\mathbf{p})|^2 d^3p. \end{aligned} \quad (2)$$

Отсюда, по аналогии с нерелятивистским случаем, функцию $a^+(\mathbf{p})$ (точнее, $a^+(\mathbf{p}, t) = a^+(\mathbf{p}) e^{-i\varepsilon t/\hbar}$) следует рассматривать как волновую функцию состояния частицы в импульсном представлении в обычном квантовомеханическом смысле и использовать значение $Q^+ = 1$ для ее нормировки.

Аналогично можно ввести волновую функцию античастицы в импульсном представлении, используя разложение отрицательно-частотного решения $\Psi^-(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона по плоским волнам $\Psi_p^- = (\Psi_p^+)^*$,

$$\Psi^-(\mathbf{r}, t) =$$

$$= \int a^-(\mathbf{p}) \Psi_p^- d^3p = \int \sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3 \epsilon(\mathbf{p})}} a^-(\mathbf{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \epsilon t)} d^3p$$

и связь волновой функции античастицы $\Psi_c^+ = \hat{C}\Psi^- \equiv (\Psi^-)^*$ с решением Ψ^- , см. 15.2. При этом в. ф. античастицы в импульсном представлении имеет вид $a_c^+(\mathbf{p}, t) = a^{-*}(\mathbf{p}) e^{-i\epsilon t/\hbar}$ а условие ее нормировки $\int |a_c^+(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = 1$ эквивалентно значению $Q^- = -1$.

То обстоятельство, что волновая функция частицы в импульсном представлении имеет обычный смысл амплитуды вероятности, позволяет, исходя непосредственно из импульсного представления, получить обобщение соответствующих квантово-механических формул и на координатное представление, см. в связи с этим задачи 15.8—15.10.

Подчеркнем, что согласно формуле (1) переход от импульсного представления к координатному отличается от нерелятивистского случая появлением дополнительного множителя $\sqrt{mc^2/\epsilon(\mathbf{p})}$ в разложении в. ф. Ψ^+ по плоским волнам. Формально именно с этим обстоятельством и связана невозможность введения положительно определенной величины $\rho \geq 0$, претендующей на роль плотности вероятностей для координат.

Несмотря на отмеченный ранее ограниченный смысл локализованных состояний частицы в релятивистском случае, методически поучительно обсудить вопрос о собственных функциях координаты на примере бесспиновой частицы. Исходным³⁾ при этом является вид оператора координаты, $\hat{\mathbf{r}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}$, в импульсном представлении. В этом представлении искомые с. ф.

$$a_{\mathbf{r}_0}^+(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}_0),$$

³⁾ Несколько иной подход к этому вопросу и обсуждение роли таких локализованных состояний см. в книге: *Е. Вигнер. Этюды о симметрии*. М.: Мир, 1971.

как и в нерелятивистском случае; здесь и ниже $\hbar = c = 1$. В координатном представлении согласно формуле (1) получаем

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{r}_0}^+(\mathbf{r}) &= \int \frac{\sqrt{m}}{(2\pi)^{3/2} (p^2 + m^2)^{1/4}} a_{\mathbf{r}_0}^+(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} d^3p = \\ &= -\frac{1}{2\pi^2} \frac{m}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \int_0^\infty \frac{\cos(m p \tilde{r})}{(p^2 + 1)^{1/4}} dp = \\ &= \frac{m^3}{(2\pi^2)^{3/4} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} \frac{K_{5/4}(m\tilde{r})}{(m\tilde{r})^{5/4}}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\tilde{r} = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$. Для выполнения интегрирования по импульсам в первом интеграле использованы сферические координаты с полярной осью вдоль направления вектора $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$; для второго (однократного) интеграла использовано его выражение через функцию Макдональда, см. [33, с. 973].

Обсудим свойства собственных функций $\Psi_{\mathbf{r}_0}^+(\mathbf{r})$. Прежде всего, отметим предельные случаи (мы «восстановили» \hbar и c):

$$\Psi_{\mathbf{r}_0}^+(\mathbf{r}) \sim \begin{cases} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^{5/2}}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \ll \frac{\hbar}{mc}, \\ \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^{7/4}} \exp\left(-\frac{mc}{\hbar} |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|\right), & |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \gg \frac{\hbar}{mc}. \end{cases} \quad (4)$$

Эти с. ф. не сводятся к $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, как в нерелятивистском случае, а локализованы на расстояниях порядка комптоновской длины волны частицы \hbar/mc . В нерелятивистском пределе, т. е. при $c \rightarrow \infty$, область локализации функции $\Psi_{\mathbf{r}_0}^+(\mathbf{r})$ стягивается в точку и так как при этом $\int \Psi_{\mathbf{r}_0}^+(\mathbf{r}) dV = 1$ (для вычисления интеграла удобно подставить в него разложение (3) в. ф. по плоским волнам и выполнить сначала интегрирование по переменной \mathbf{r} , дающее $\delta(\mathbf{p})$), то в этом пределе с. ф. $\Psi_{\mathbf{r}_0}^+(\mathbf{r})$ сводится к $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, как и следовало ожидать.

15.8. Для вывода искомого соотношения воспользуемся тем обстоятельством, что для свободной частицы волновая функция в импульсном представлении

$$a^+(\mathbf{p}, t) = a^+(\mathbf{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon(\mathbf{p}) t\right) \quad (1)$$

имеет, как и в нерелятивистской квантовой механике, обычный смысл амплитуды вероятностей импульсов, см. предыдущую

задачу. Поэтому при нормировке этой волновой функции

$$\int |a^+(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = 1 \quad (2)$$

среднее значение энергии частицы дается обычным выражением

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \int \varepsilon(\mathbf{p}) |a^+(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = \\ &= \int a^{+\ast}(\mathbf{p}, t) \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} a^+(\mathbf{p}, t) d^3p. \end{aligned} \quad (3)$$

Теперь заметим, что в координатном представлении волновая функция $\Psi^+(\mathbf{r}, t)$ произвольного состояния свободной частицы описывается суперпозицией положительно частотных решений уравнения Клейна — Гордона (XV.1), связанной с в.ф. в импульсном представлении соотношением

$$\Psi^+(\mathbf{r}, t) = \int \sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon(\mathbf{p})}} a^+(\mathbf{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad (4)$$

см. 15.1 и 15.7, из которого следует

$$\sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon(\mathbf{p})}} a^+(\mathbf{p}, t) = \int \Psi^+(\mathbf{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}} \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (5)$$

Используя последнее соотношение, преобразуем выражение (3) следующим образом:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int (p^2 c^2 + m^2 c^4) \Psi^{+\ast}(\mathbf{r}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \Psi^+(\mathbf{r}', t) d^3p \times \\ &\times d^3r' d^3r = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int \Psi^{+\ast}(\mathbf{r}, t) (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \times \\ &\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right] \Psi^+(\mathbf{r}', t) d^3p d^3r' d^3r \end{aligned} \quad (6)$$

(обратить внимание на порядок расположения сомножителей в последнем интеграле, удобный для его дальнейших преобразований). После выполнения в (6) интегрирования по импульсам с помощью формулы

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right] d^3p = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

элементарно выполняется интегрирование и по \mathbf{r}' , так что для среднего значения энергии частицы получаем следующее выражение:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{mc^2} \int \Psi^{+\ast}(\mathbf{r}, t) (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \Psi^+(\mathbf{r}, t) d^3r. \quad (7)$$

При этом условии нормировки (2) волновой функции в координатном представлении принимает вид (см. формулу (2) предыдущей задачи)

$$\int |a^+(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi^{+\ast} \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^{+\ast}}{\partial t} \Psi^+ \right\} d^3r = 1. \quad (8)$$

Можно получить и несколько иное, эквивалентное (7) выражение для среднего значения энергии частицы, если воспользоваться вытекающим из формул (1) и (5) соотношением

$$-i \frac{\sqrt{\bar{\epsilon}}}{\hbar} a^+(\mathbf{p}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \frac{a^+(\mathbf{p}, t)}{\sqrt{\bar{\epsilon}}} = \frac{1}{\sqrt{mc^2}} \int e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (9)$$

С помощью выражения (9) формулу (3) легко записать в координатном представлении следующим образом:

$$\bar{\epsilon} = \frac{\hbar^2}{mc^2} \int \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^+(\mathbf{r}, t) \right)^{\ast} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+(\mathbf{r}, t) d^3r. \quad (10)$$

Согласно полученным выражениям (7) и (10) среднюю энергию бесспиновой частицы можно записать также в виде

$$\bar{\epsilon} = \frac{\hbar^2}{2m} \int \left\{ \frac{\partial \Psi^{+\ast}}{c \partial t} \frac{\partial \Psi^+}{c \partial t} + (\nabla \Psi^+)^{\ast} (\nabla \Psi^+) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} |\Psi^+|^2 \right\} d^3r, \quad (11)$$

аналогичном (с точностью до нормировочного множителя) энергии классического скалярного (или псевдоскалярного) комплексного поля, удовлетворяющего волновому уравнению

$$\left(-\Delta + \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} + \kappa^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \kappa = \frac{mc}{\hbar}.$$

Энергия такого поля $E = \int T_{00} d^3r$ выражается через компоненту T_{00} (или T_{44}) тензора энергии-импульса, имеющую вид [27]

$$T_{00} \propto \left[\frac{\partial \Psi^{\ast}}{c \partial t} \frac{\partial \Psi}{c \partial t} + (\nabla \Psi^{\ast}) (\nabla \Psi) + \kappa^2 \Psi^{\ast} \Psi \right],$$

см. также следующую задачу о связи среднего импульса частицы с импульсом классического поля.

В заключение заметим, что проведенное рассмотрение непосредственно переносится на случай античастицы, если для

описания ее состояний используется зарядово-сопряженная волновая функция $\Psi_c^+(\mathbf{r}, t)$, см. 15.2 и 15.3.

15.9. Как и при решении предыдущей задачи, исходим из импульсного представления, в котором волновая функция частицы, как и в нерелятивистской квантовой механике, имеет смысл амплитуды вероятностей значений импульса. При этом среднее значение импульса частицы определяется выражением

$$\bar{\mathbf{p}} = \int \mathbf{p} |a^+(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = \int a^+(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} a(\mathbf{p}, t) d^3p. \quad (1)$$

Используя соотношения (см. формулы (5), (9) решения предыдущей задачи; там же обсуждается связь в.ф. в координатном и импульсном представлениях и используемая нормировка в.ф.)

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon(\mathbf{p})}} a^+(\mathbf{p}, t) &= \int \Psi^+(\mathbf{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}} \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \\ -\frac{i}{\hbar} \sqrt{mc^2 \varepsilon} a^+(\mathbf{p}, t) &= \int e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+(\mathbf{r}, t) \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \end{aligned}$$

выражение (1) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{p}} &= \frac{i\hbar}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int \Psi^{+*}(\mathbf{r}, t) \mathbf{p} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+(\mathbf{r}', t) d^3p d^3r' d^3r = \\ &= \frac{\hbar^2}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int \Psi^{+*}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+(\mathbf{r}', t) d^3p d^3r' d^3r. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь элементарно выполняется интегрирование сначала по переменной \mathbf{p} (дающее множитель $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$), а затем и по \mathbf{r}' , что позволяет получить искомое выражение для среднего импульса частицы:

$$\bar{\mathbf{p}} = \frac{\hbar^2}{mc^2} \int \Psi^{+*}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+(\mathbf{r}, t) d^3r. \quad (3)$$

Имея в виду отмеченные преобразования, легко сообразить, что оно может быть записано в более симметричной форме:

$$\bar{\mathbf{p}} = -\frac{\hbar^2}{2mc^2} \int \left\{ \frac{\partial \Psi^{+*}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^{+*}}{\partial t} \frac{\partial \Psi^+}{\partial \mathbf{r}} \right\} d^3r. \quad (4)$$

Это выражение для среднего импульса бесспиновой частицы с точностью до нормировочного коэффициента имеет такой же вид, как и формула для импульса классического скалярного (или псевдоскалярного) комплексного поля. Компоненты им-

пульса поля определяются выражением $P_i = \int T_{i0} d^3r$, где T_{i0} (или T_{i4}) — плотность импульса поля, являющаяся соответствующей компонентой тензора энергии-импульса [27]; при этом

$$T_{i0} \propto - \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x_i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right),$$

где $i = 1, 2, 3$ (сравнить с аналогичным замечанием в предыдущей задаче относительно энергии).

15.10. Задача решается аналогично двум предыдущим. Исходя из формулы для средних значений компонент орбитального момента частицы в импульсном представлении

$$\bar{\Gamma} = \int a^{+*} \hat{L} a^+ d^3p = -i \int a^{+*}(\mathbf{p}, t) [\mathbf{p} \nabla_{\mathbf{p}}] a^+(\mathbf{p}, t) d^3p$$

и используя преобразования, аналогичные описанным в решениях указанных задач, приходим к выражению

$$\bar{\Gamma} = \frac{\hbar}{mc^2} \int \Psi^{+*}(\mathbf{r}, t) \left[\mathbf{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+(\mathbf{r}, t) d^3r,$$

или в более симметричной форме:

$$\bar{\Gamma} = - \frac{\hbar}{2mc^2} \int \left[\mathbf{r}, \left\{ \frac{\partial \Psi^{+*}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^{+*}}{\partial t} \frac{\partial \Psi^+}{\partial \mathbf{r}} \right\} \right] d^3r. \quad (1)$$

В таком виде оно совпадает с формулой для момента \mathbf{L} классического скалярного поля (сравнить с аналогичными замечаниями в отношении энергии и импульса, сделанными в указанных выше задачах). При этом выражение для плотности λ момента поля имеет наглядный физический смысл, так как его можно записать в виде

$$\lambda(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\hbar} [\mathbf{r} \boldsymbol{\pi}],$$

где $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}, t)$ является плотностью импульса поля, см. предыдущую задачу.

15.11. Энергетический спектр и соответствующие волновые функции стационарных состояний определяются из решения (стационарного) уравнения Клейна — Гордона для заряженной частицы в магнитном поле, имеющего вид

$$\left\{ c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi = \mathcal{E} \Psi; \quad (1)$$

здесь e — заряд частицы, $\mathcal{E} = \text{rot } \mathbf{A}$. Это уравнение отличается от нерелятивистского уравнения Шрёдингера

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi = E \Psi \quad (2)$$

лишь заменой E на $(e^2 - m^2c^4)/2mc^2$. Поэтому, воспользовавшись известными результатами решения последнего уравнения для частицы в однородном магнитном поле в 7.1, где оно было получено при различных калибровках векторного потенциала, в релятивистском случае находим

$$\varepsilon_{p_z n}^2 = m^2c^4 + p_z^2c^2 + 2mc^2\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

$$n = 0, 1, \dots, \quad \omega = \frac{|e|\hbar c}{mc} > 0.$$

Отсюда следует

$$\varepsilon_{p_z n} = \pm \sqrt{m^2c^4 + p_z^2c^2 + 2mc^2\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} \quad (3)$$

(сравнить с $\varepsilon(p) = \pm \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ для свободной частицы).

Интерпретация двух значений $\varepsilon_{p_z n}$, отличающихся знаком точно такая же, как и в случае свободной частицы (см. 15.2, а также 15.3). Одно из них, $\varepsilon_{p_z n} > mc^2$, описывает энергетический спектр частицы, заряд которой равен e , как и в уравнении (1). Отрицательные значения $\varepsilon_{p_z n} < -mc^2$ ассоциируются с состояниями античастицы, имеющей заряд $-e$; при этом энергия античастицы равна $(-e) > mc^2$. Таким образом, энергетические спектры частицы и античастицы в магнитном поле одинаковы (это обстоятельство очевидно заранее, так как энергетический спектр не зависит от знака заряда частицы).

В заключение сделаем замечание о характере энергетического спектра. Как и в нерелятивистском случае, он имеет непрерывную зависимость от p_z , связанную со свободным продольным (вдоль магнитного поля) движением частицы, а также включает дискретную зависимость от квантового числа n , связанную с поперечным движением частицы (носящим финитный характер). При этом поперечное движение частицы отражается на кинематике свободного продольного движения (в отличие от нерелятивистского случая) и согласно формуле (3) может быть наглядно описано как «изменение»

$$m \rightarrow m_n = m \sqrt{1 + (2n + 1) \frac{\hbar\omega}{mc^2}}$$

массы частицы.

15.12. Энергетический спектр частицы в скалярном поле определяется из решения уравнения

$$[-\hbar^2c^2\Delta + 2mc^2U(r)]\Psi = (e^2 - m^2c^4)\Psi. \quad (1)$$

Оно имеет вид нерелятивистского уравнения Шрёдингера для частицы в потенциале $U(r)$, в котором энергия E заменена на $(\epsilon^2 - m^2c^4)/2mc^2$. Ограничиваясь рассмотрением s -состояний частицы (так что в. ф. является сферически симметричной) и сделав подстановку $R(r) = r\Psi(r)$, приводим уравнение (1) к виду

$$-\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} U(r) R = \frac{\epsilon^2 - m^2c^4}{\hbar^2c^2} R. \quad (2)$$

Для рассматриваемой потенциальной ямы его решение, удовлетворяющее граничному условию $R(0) = 0$, в случае $(\epsilon^2 - m^2c^4) < 0$ описывается выражениями

$$R(r) = \begin{cases} A \sin \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - \kappa^2} r, & r < a, \\ B e^{-\kappa r}, & r > a, \end{cases}$$

где

$$\kappa = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{m^2c^4 - \epsilon^2} > 0 \quad (3)$$

(так как $U = 0$ при $r > a$, то в области значений $\epsilon^2 > m^2c^4$ энергетический спектр непрерывный; рассеяние на скалярном потенциале рассмотрено в 15.19). Условия непрерывности в. ф. и ее производной в точке $r = a$ приводят к трансцендентному уравнению

$$\operatorname{tg} \sqrt{\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} - \kappa_n^2 a^2} = -\frac{1}{\kappa_n a} \sqrt{\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} - \kappa_n^2 a^2}, \quad (4)$$

определяющему энергетический спектр связанных s -состояний.

Обсудим основные особенности энергетического спектра, которые легко понять, имея в виду отмеченную выше аналогию рассматриваемой задачи с задачей об уровнях д. с. нерелятивистской частицы в сферической потенциальной яме.

1) В достаточно «мелкой» яме связанные состояния отсутствуют; они, как и в нерелятивистском случае, появляются лишь при выполнении условия $U_0 > \pi^2 \hbar^2 / 8ma^2$.

2) При дальнейшем углублении ямы (т. е. при увеличении параметра U_0a^2) будут появляться новые дискретные уровни; при этом для уже существующих уровней значение величины $(m^2c^4 - \epsilon_n^2)$ будет увеличиваться, что соответствует увеличению $|E_n|$ при углублении ямы в нерелятивистском случае, т. е. ϵ_n^2 уменьшается при углублении ямы.

3) Специфическая для релятивистского случая ситуация при углублении потенциальной ямы возникает при достижении

основным уровнем значения $\epsilon_0^2 = 0$. При дальнейшем увеличении U_0 значение ϵ_0 становится мнимым, что свидетельствует о появлении неустойчивости в рассматриваемой задаче.

Для понимания причины возникновения такой неустойчивости необходимо иметь в виду следующее обстоятельство. Решение задачи позволяет найти величину ϵ_n^2 , так что при этом $\epsilon_n = \pm \sqrt{\epsilon_n^2}$. Получающиеся два значения энергии, различающиеся знаком, следует интерпретировать так же, как и в случае свободной частицы: одно из них, $\epsilon_n > 0$, дает уровни энергии частицы, другое, $\epsilon_n < 0$, отвечает уже античастице, энергия которой равна $(-\epsilon_n) > 0$. Действительно, при уменьшении глубины ямы все уровни $\epsilon_n > 0$ идут вверх и переходят в верхний континуум $\epsilon > mc^2$, а уровни $\epsilon_n < 0$ «сливаются» с нижним континуумом $\epsilon < -mc^2$. Соответственно, энергетический спектр частицы и античастицы во внешнем скалярном поле одинаков, т. е. поле оказывает на них одинаковое воздействие (в отличие, например, от электростатического поля, сравнить с 15.3 и 15.4).

Таким образом при рассматриваемых *критических* значениях параметров ямы (ее глубины и ширины) энергия основного состояния как частицы, так и античастицы в яме принимает значение $\epsilon_0 = 0$. При этом оказывается возможным спонтанное рождение пар «частица + античастица» (или одиночных частиц, если они истинно нейтральные). Именно это обстоятельство является физической причиной возникновения отмеченной выше неустойчивости решения одночастичной задачи в сильном внешнем поле⁴). В сильных полях возникает также перестройка вакуума, см. по затронутым вопросам монографию А. Б. Мигдала [31].

Обсудим зависимость критического значения $U_{0, \text{кр}}$ глубины ямы от ее ширины a . Положив в формулах (3), (4) $\epsilon_0 = 0$, приходим к уравнению

$$\text{tg} \left\{ \frac{mca}{\hbar} \sqrt{\frac{2U_{0, \text{кр}}}{mc^2} - 1} \right\} = - \sqrt{\frac{2U_{0, \text{кр}}}{mc^2} - 1}. \quad (5)$$

⁴) Заметим, что одночастичная задача теряет физический смысл также и в случае не слишком сильных полей, если они являются быстропеременными во времени, так что существенно отличны от нуля фурье-компоненты «потенциала» $U(\omega)$, отвечающие частотам $\omega \gtrsim mc^2/\hbar$. Формально неприменимость одночастичного подхода в этом случае связана с невозможностью «разбиения» решений волнового уравнения на независимые положительно- и отрицательно-частотные части (из-за переходов между ними), являющегося существенным элементом в интерпретации решений волнового уравнения, сопоставляемых состояниям одной частицы (или античастицы; физическая причина состоит в возможности рождения новых частиц).

Из него в предельных случаях «широкой», $a \gg \hbar/mc$, и «узкой», $a \ll \hbar/mc$, ям имеем:

$$\begin{aligned} \text{а)} \quad U_{0, \text{кр}} &\approx \frac{mc^2}{2} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(\approx \frac{mc^2}{2} \right), & a &\gg \frac{\hbar}{mc}, \\ \text{б)} \quad U_{0, \text{кр}} &\approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} + \frac{mc^2}{2} (\gg mc^2), & a &\ll \frac{\hbar}{mc} \end{aligned} \quad (6)$$

(отметим, что независимо от ширины ямы $U_{0, \text{кр}} > mc^2/2$; приведенные выражения определяют наименьший корень $U_{0, \text{кр}}$ уравнения (5), другие корни уравнения отвечают обращению в нуль ϵ_n^2 с $n \geq 1$). Как видно, «широкая» скалярная яма «съедает» энергию покоя при глубине $U_0 \approx mc^2/2$. По мере уменьшения ширины глубина критической ямы возрастает. В отмеченном случае б) «узкой» ямы значение $U_{0, \text{кр}}$ относительно мало отличается от глубины ямы, отвечающей возникновению связанного состояния.

15.13. Уровни энергии и соответствующие им волновые функции определяются из решения уравнения Клейна — Гордона (стационарной формы уравнения (XV. 2) с $\mathbf{A} = 0$ и $\varphi = Ze/r$):

$$\{-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4\} \Psi = \left(\epsilon + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \Psi. \quad (1)$$

Учитывая сферическую симметрию задачи, решение уравнения ищем в виде $\Psi(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. При этом из (1) следует

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 [(l + 1/2)^2 - 1/4]}{2mr^2} - \frac{Ze^2 \epsilon}{mc^2 r} - \frac{Z^2 e^4}{2mc^2 r^2} \right\} R = \frac{\epsilon^2 - m^2 c^4}{2mc^2} R. \quad (2)$$

Это уравнение имеет форму радиального уравнения Шрёдингера (IV. 2) для водородоподобного атома в нерелятивистской теории:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 [(l + 1/2)^2 - 1/4]}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right\} \tilde{R}_{n_r l} = E_{n_r l} \hat{R}_{n_r l}$$

и получается из него с помощью следующих замен ($\alpha = e^2/\hbar c$):

$$\begin{aligned} Z &\rightarrow \frac{Ze}{mc^2}, & \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 &\rightarrow \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - Z^2 \alpha^2, \\ E_{n_r l} &\rightarrow \frac{\epsilon^2 - m^2 c^4}{2mc^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Теперь, воспользовавшись известным выражением для энергетического спектра нерелятивистского водородоподобного атома

$$E_{n_r l} \equiv E_n = -\frac{m (Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{m (Ze^2)^2}{2\hbar^2 (n_r + 1/2 + l + 1/2)^2} \quad (4)$$

и произведя в нем замены (3), находим

$$(\epsilon^2 - m^2 c^4) \left[n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{(l + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} \right]^2 = - Z^2 \alpha^2 \epsilon^2.$$

Отсюда следует выражение для искомого энергетического спектра:

$$\epsilon_{n_r, l} = mc^2 \left\{ 1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{Z^2 \alpha^2 + \left[n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{(l + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} \right]^2} \right\}^{1/2} \quad (5)$$

(формально здесь в правой части следовало бы ввести два знака, \pm , однако выбор знака « \rightarrow » отвечает «лишним» уровням, не входящим в энергетический спектр; такие уровни ассоциировались бы со связанными состояниями античастицы, а их в условиях рассматриваемой задачи, т. е. для точечного ядра, нет, сравнить с 15.16).

Сделаем несколько замечаний в связи с полученным результатом (5). Как видно, учет релятивистских эффектов снимает «случайное» вырождение уровней в кулоновском поле в нерелятивистской теории: теперь они зависят от орбитального момента частицы. В случае $Z\alpha \ll 1$ из формулы (5) следует

$$E_{n_r, l} = \epsilon_{n_r, l} - mc^2 \approx - \frac{m (Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2} - Z\alpha \frac{m (Ze^2)^2}{\hbar^2 n^3} \left(\frac{1}{2l + 1} - \frac{3}{8n} \right). \quad (6)$$

Второе слагаемое здесь представляет релятивистскую поправку к результату нерелятивистской теории, сравнить с 11.1.

При значениях $Z\alpha > 1/2$ формула (5) приводит к комплексным значениям энергии (сначала для s -состояний, а затем и для больших значений орбитального момента), что указывает на появление неустойчивости в рассматриваемой задаче. Причину ее легко понять, если заметить, что слагаемое $-Z^2 e^4 / 2mc^2 r^2$ в уравнении (2), сингулярное при $r \rightarrow 0$, можно рассматривать как часть потенциальной энергии, имеющую характер притяжения. При значениях $Z\alpha > 1/2$ такое притяжение является настолько сильным, что возникает «падение на центр», см. [1], а также 9.14. При учете конечности размеров ядра потенциал ограничен и соответственно такой неустойчивости уже не возникает. Однако даже в случае ядра конечного радиуса R дальнейшее увеличение его заряда приводит при некотором значении $Z_{кр}$ (зависящем от радиуса R) к появлению новой неустойчивости спектра рассматриваемой системы. Физическая причина ее аналогична обсуждавшейся в предыдущей задаче: в достаточно сильном электростатическом поле (как и в скалярном поле) становится энергетически возможным спонтанное рождение пар «час-

тица + античастица», так что одночастичная задача теряет физический смысл. В таких сильных полях возникает также перестройка вакуума. В связи с этим отметим, что неустойчивость вакуума относительно рождения электрон-позитронных пар в поле ядра с обычной плотностью возникает при заряде ядра $Z_{кр} \approx 170$; см. по затронутым вопросам [31].

15.14. Уравнение Клейна — Гордона для свободной частицы (XV. 1) можно записать в виде

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \sqrt{c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 + m^2 c^4} \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \sqrt{c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 + m^2 c^4} \right) \Psi_{\text{КГ}} = 0. \quad (1)$$

Его решения $\Psi_{\text{КГ}}^+$, описывающие физически реализуемые состояния частицы, соответствуют положительным энергиям (частотам), см. 15.1, и удовлетворяют уравнению

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \sqrt{c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 + m^2 c^4} \right) \Psi_{\text{КГ}}^+ = 0, \quad (2)$$

имеющему уже вид уравнения Шрёдингера, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$, с гамильтонианом

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_{\text{rel}} = \sqrt{c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 + m^2 c^4} \quad (3)$$

(для отрицательно-частотных решений уравнения имеем

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^- = -\hat{H} \Psi^-$; после выполнения зарядового сопряжения,

$\Psi_c^+ = \hat{C} \Psi^-$, это уравнение принимает вид (2), но уже для волновой функции Ψ_c^+ античастицы, см. 15.2).

Для перехода к нерелятивистскому случаю сделаем подстановку

$$\Psi_{\text{КГ}}^+ = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} mc^2 t \right) \Psi \quad (4)$$

(выделение здесь экспоненциального множителя соответствует записи энергии частицы в виде $\varepsilon = mc^2 + E$, т. е. выделению из нее энергии покоя mc^2) и выполним разложение радикала в (2) по степеням $\hat{\mathbf{p}}^2/m^2 c^2$. В результате приходим к уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(\frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{1}{8m^3 c^2} \hat{\mathbf{p}}^4 + \frac{1}{16m^5 c^4} \hat{\mathbf{p}}^6 + \dots \right) \Psi, \quad (5)$$

где второе и последующие слагаемые в скобках в правой части уравнения представляют релятивистские поправки к гамильтониану $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$ свободной нерелятивистской частицы.

В заключение обратим внимание на следующее обстоятельство. Из уравнения Клейна — Гордона следует сохранение во

времени величины $Q^+ = \int \rho^+ dV$, где ρ^+ определяется выражением (XV.3) с $\varphi \equiv 0$, см. также 15.1. В то же время согласно уравнению Шрёдингера (5) сохраняется значение $Q = \int \rho dV$, где уже $\rho = |\Psi|^2$. Сравним Q^+ и Q . Для Q^+ с учетом уравнения (2) имеем

$$Q^+ = \frac{1}{mc^2} \int \Psi_{\text{КГ}}^{+*} \sqrt{c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 + m^2 c^4} \Psi_{\text{КГ}}^+ dV. \quad (6)$$

Для справедливости соотношения $Q^+ = Q$ ($=1$ для нормированных волновых функций) при переходе от $\Psi_{\text{КГ}}^+$ к шрёдингеровской в. ф. Ψ в принципе следует выполнить, в дополнение к (3), неунитарное (!) преобразование

$$\Psi_{\text{КГ}}^+ = \hat{S} \Psi, \quad \hat{S} = (1 + \hat{\mathbf{p}}^2 / m^2 c^2)^{-1/4}, \quad (7)$$

обеспечивающее сохранение нормировки при различных способах ее определения (при обычных унитарных преобразованиях остаются неизменными как значение, так и вид $-\int |\Psi|^2 dV = \text{const}$ — нормировочного интеграла). Однако в случае свободной частицы оператор этого преобразования \hat{S} коммутирует с гамильтонианом и поэтому уравнение (2) имеет такой же вид, как и уравнение для шрёдингеровской в. ф. $\Psi = \hat{S}^{-1} \Psi_{\text{КГ}}^+$; сравнить со случаем частицы во внешнем поле, рассмотренным в 15.15.

15.15. Стационарное уравнение Клейна — Гордона для заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле

$$\left\{ c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi_{\text{КГ}}^+ = (e - e\varphi)^2 \Psi_{\text{КГ}}^+$$

в случае $|e\varphi| \ll mc^2$ и $|E| \ll mc^2$, где $\varepsilon = mc^2 + E$, удобно записать в виде (далее индекс $(+)$ у в. ф. $\Psi_{\text{КГ}}^+$, см. 15.1 и 15.3 опускаем):

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi - E \right\} \Psi_{\text{КГ}} = \frac{(E - e\varphi)^2}{2mc^2} \Psi_{\text{КГ}}. \quad (1)$$

При этом правая часть уравнения много меньше каждого из слагаемых левой части, и, пренебрегая ею, получаем в «нулевом» приближении уравнение Шрёдингера нерелятивистской теории с гамильтонианом $\hat{H}_0 = \hat{\pi}^2 / 2m + e\varphi$, где $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c$.

Расчет релятивистских поправок к гамильтониану связан с последовательным вычислением членов его разложения по степеням параметра, включающего множитель $1/c^2$, и основан на возможности приближенного преобразования уравнения (1) к

виду уравнения Шрёдингера (с точностью, соответствующей рассматриваемому приближению по $1/c^2$). Теперь ситуация отличается от случая свободной частицы, для которой сразу можно написать замкнутое выражение для релятивистского гамильтониана, см. формулу (3) предыдущей задачи.

Начнем с вычисления первой, $\propto 1/c^2$, поправки. Имея в виду, что в правой части уравнения (1) уже фигурирует множитель $1/c^2$, замечаем, что в ней можно заменить $(E - e\varphi)^2 \Psi_{\text{КГ}}$ его значением в «нулевом» приближении. Так как в этом приближении

$$(E - e\varphi) \Psi_{\text{КГ}} \approx (\hat{H}_0 - e\varphi) \Psi_{\text{КГ}} = \frac{1}{2m} \hat{\pi}^2 \Psi_{\text{КГ}}, \quad (2)$$

то в правой части уравнения (1) можно выполнить следующие преобразования:

$$\begin{aligned} (E - e\varphi)^2 \Psi_{\text{КГ}} &\approx \\ &\approx (E - e\varphi) \frac{\hat{\pi}^2}{2m} \Psi_{\text{КГ}} = \left\{ -\frac{1}{2m} [e\varphi, \hat{\pi}^2] + \frac{1}{2m} \hat{\pi}^2 (E - e\varphi) \right\} \Psi_{\text{КГ}} \approx \\ &\approx \left\{ -\frac{1}{2m} [e\varphi, \hat{\pi}^2] + \frac{1}{4m^2} \hat{\pi}^4 \right\} \Psi_{\text{КГ}}. \end{aligned}$$

В результате это уравнение с рассматриваемой точностью, $\sim 1/c^2$, принимает вид

$$\left\{ \frac{\hat{\pi}^2}{2m} + e\varphi - \frac{\hat{\pi}^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{4m^2c^2} [e\varphi, \hat{\pi}^2] \right\} \Psi_{\text{КГ}} = E \Psi_{\text{КГ}}. \quad (3)$$

Хотя внешне оно подобно уравнению Шрёдингера, но таковым еще не является. Это связано с тем, что оператор в фигурных скобках, претендующий на роль гамильтониана, не является эрмитовым. Для перехода от уравнения (3) к искомому уравнению Шрёдингера следует еще выполнить преобразование волновой функции вида

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{КГ}} = \hat{S} \Psi &= [(e - e\varphi)/mc^2]^{-1/2} \Psi = [1 + (E - e\varphi)/mc^2]^{-1/2} \Psi = \\ &= \left[1 - \frac{1}{2mc^2} (E - e\varphi) + \frac{3}{8m^2c^4} (E - e\varphi)^2 + \dots \right] \Psi. \quad (4) \end{aligned}$$

Такое неунитарное преобразование обеспечивает сохранение нормировки в. ф.

$$\int \Psi_{\text{КГ}}^* \frac{1}{mc^2} (e - e\varphi) \Psi_{\text{КГ}} dV = \int |\Psi|^2 dV,$$

обсуждение этого вопроса см. в предыдущей задаче.

Подставив выражение (4) с учетом в нем членов порядка ⁵⁾ $1/c^2$ в уравнение (3) и заметив, что в рассматриваемом приближении, как и выше, можно в слагаемых с $1/c^2$ воспользоваться соотношением (2), приходим к уравнению Шрёдингера с первой релятивистской поправкой

$$\left\{ \frac{1}{2m} \hat{\pi}^2 - \frac{1}{8m^3 c^2} \hat{\pi}^4 + e\varphi \right\} \Psi = E\Psi. \quad (5)$$

Как видно, эта поправка к гамильтониану, равная $-\hat{\pi}^4/8m^3 c^2$, такая же, как и в случае свободной частицы, и представляет естественное квантовомеханическое обобщение соответствующей релятивистской поправки в классической теории. Следует, однако, подчеркнуть, что такая «естественность» пропадает уже в членах $\sim 1/c^4$.

Для вычисления поправок $\sim 1/c^4$ (и более высокого порядка) удобно, перенеся в (1) слагаемое $(E - e\varphi) \Psi_{\text{КГ}}$ направо, сначала перейти согласно (4) к уравнению для шрёдингеровской волновой функции. С рассматриваемой точностью получаем уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\hat{\pi}^2}{2m} \left(1 - \frac{E - e\varphi}{2mc^2} + \frac{3(E - e\varphi)^2}{8m^3 c^4} \right) \Psi = \\ = (E - e\varphi) \left(1 + \frac{(E - e\varphi)^2}{8m^2 c^4} \right) \Psi. \end{aligned} \quad (6)$$

Как и выше, в слагаемых, содержащих множителем $1/c^4$, для выражения $(E - e\varphi) \Psi$ можно воспользоваться «нулевым» приближением и заменить его на $(\hat{\pi}^2/2m) \Psi$. В слагаемых же с $1/c^2$ следует учесть и члены 1-го порядка, т. е. заменить

$$(E - e\varphi) \Psi \quad \text{на} \quad \left(\frac{1}{2m} \hat{\pi}^2 - \frac{1}{8m^3 c^2} \hat{\pi}^4 \right) \Psi.$$

После простых алгебраических преобразований уравнение (6) принимает вид уравнения Шрёдингера с гамильтонианом

$$\hat{H}' = \hat{H} + \frac{1}{16m^3 c^4} \left[\left(\frac{1}{2m} \hat{\pi}^2 + e\varphi \right), [\hat{\pi}^2, e\varphi] \right] \quad (7)$$

(который мы снабдили штрихом по отмеченному ниже обстоятельству), где

$$\hat{H} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m} + e\varphi - \frac{\hat{\pi}^4}{8m^3 c^2} + \frac{\hat{\pi}^6}{32m^5 c^4} + \frac{1}{32m^4 c^4} [\hat{\pi}^2, [\hat{\pi}^2, e\varphi]]. \quad (8)$$

Установленный вид оператора \hat{H}' в принципе решает поставленную задачу. Однако этот гамильтониан можно несколько

⁵⁾ Заметим, что в «нулевом» приближении $\Psi_{\text{КГ}} = \Psi$.

упростила, имея в виду возможность выполнения унитарного преобразования, изменяющего выражение для гамильтониана, но оставляющего неизменным физическое содержание теории. Для этого заметим, что с рассматриваемой точностью, $\sim 1/c^4$, во втором слагаемом в правой части соотношения (7) можно заменить $\hat{\pi}^2/2m + e\varphi$ на \hat{H} . При этом \hat{H}' с такой же точностью принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{H}' &\approx \hat{H} + \frac{1}{16m^3c^4} [\hat{H}, [\hat{\pi}^2, e\varphi]] \approx \\ &\approx \exp\left(-\frac{1}{16m^3c^4} [\hat{\pi}^2, e\varphi]\right) \hat{H} \exp\left(\frac{1}{16m^3c^4} [\hat{\pi}^2, e\varphi]\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Так как оператор $\hat{F} = i[\hat{\pi}^2, e\varphi]$ является эрмитовым, а $\hat{U} = \exp(i\hat{F})$ — унитарным, то согласно (9) операторы \hat{H} и \hat{H}' связаны унитарным преобразованием и с одинаковым правом могут рассматриваться как гамильтониан частицы. Поскольку выражение для \hat{H} несколько проще чем \hat{H}' , то более удобно использовать именно его. Как видно, релятивистские поправки к гамильтониану, следующие из уравнения Клейна — Гордона, уже в членах $\sim 1/c^4$ отличаются от разложения оператора $\hat{H}_{\text{rel}} = \sqrt{\hat{\pi}^2c^2 + m^2c^4} + e\varphi$.

15.16. Ограничимся для наглядности случаем, когда энергия частицы близка к энергии покоя, и запишем $\varepsilon = mc^2 + E$, где $|E| \ll mc^2$. Стационарное уравнение Клейна — Гордона для частицы в электростатическом поле

$$\{-\hbar^2c^2\Delta + m^2c^4\} \Psi = (e - e\varphi)^2 \Psi$$

при этом можно записать в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + e\varphi - \frac{(e\varphi)^2}{2mc^2} + \frac{E}{mc^2} e\varphi - \frac{E^2}{2mc^2} \right\} \Psi = E\Psi,$$

аналогичном уравнению Шрёдингера с эффективной потенциальной энергией

$$U_{\text{эф}} = e\varphi + \frac{E}{mc^2} e\varphi - \frac{(e\varphi)^2}{2mc^2} - \frac{E^2}{2mc^2} \approx e\varphi - \frac{(e\varphi)^2}{2mc^2}.$$

Как видно, в случае $|e\varphi| > 2mc^2$ в соответствующей области пространства $U_{\text{эф}} < 0$, так что взаимодействие частицы с полем носит характер притяжения независимо от знака ее заряда. В связи с этим заметим, что в релятивистском случае в одном и том же сильном электростатическом поле могут существовать связанные состояния как бесспиновой частицы, так и ее античастицы, см. [31].

15.17. Стационарное уравнение Клейна — Гордона, соответствующее временному уравнению (XV. 2) с $e\varphi = Zee_1/r$ и $\mathbf{A} = 0$, может быть записано в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{Zee_1 e}{mc^2 r} - \frac{(Zee_1)^2}{2mc^2 r^2} \right\} \Psi_{\mathbf{p}_0}^+ = \frac{p_0^2}{2m} \Psi_{\mathbf{p}_0}^+, \quad (1)$$

где $e = \sqrt{p_0^2 c^2 + m^2 c^4}$, тождественном нерелятивистскому уравнению Шрёдингера с эффективной потенциальной энергией (зависящей от полной энергии e частицы)

$$U_{\text{эф}} = \frac{Zee_1 e}{mc^2 r} - \frac{(Zee_1)^2}{2mc^2 r^2}. \quad (2)$$

Так как интерпретация волновой функции свободной частицы в виде плоской волны в релятивистской и нерелятивистской теориях одинакова, то общий подход к задаче рассеяния в нерелятивистском случае, основанный на решении стационарного волнового уравнения, имеющем требуемую асимптотику на больших расстояниях (плоская + расходящаяся волны, см. вводные замечания к гл. 13):

$$\Psi_{\mathbf{p}_0}^+(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} e^{i\mathbf{p}_0 \mathbf{r} / \hbar} + \frac{f}{r} e^{ikr},$$

а соответственно и многие результаты теории рассеяния нерелятивистских частиц непосредственно переносятся (или легко обобщаются) на релятивистский случай. В частности, амплитуда рассеяния в борновском приближении описывается прежним выражением (XIII. 6):

$$f_B = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U_{\text{эф}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r, \quad \hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_0. \quad (3)$$

Более внимательным следует быть при выяснении условий применимости борновского приближения. Отмеченная выше аналогия уравнения (1) и у. Ш. предполагает использование для описания состояний свободной частицы (на больших расстояниях) ее импульса (а не скорости или энергии). Поэтому известные условия (XIII. 7) применимости борновского приближения в рассматриваемом релятивистском случае принимают вид

$$|U_{\text{эф}}| \ll \frac{\hbar p}{ma}, \quad |U_{\text{эф}}| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}. \quad (4)$$

Для первого слагаемого в выражении (2) первое из условий (4) требует выполнения неравенства

$$\left| \frac{Zee_1 e}{mc^2 r} \right| \ll \frac{\hbar p}{mr}, \quad \text{или} \quad \frac{Ze^2}{\hbar c} \ll \frac{v}{c} < 1 \quad (v e = pc^2, \quad |e_1| \sim e) \quad (5)$$

(как и в нерелятивистском случае; необходимым условием применимости теории возмущений является ограничение $Z \ll 137$). Возможность применения теории возмущений для второго слагаемого в эффективном потенциале (2) ограничивается вторым из условий (4), требующим

$$\frac{(Zee_1)^2}{mc^2 r^2} \ll \frac{\hbar^2}{mr^2}, \quad \text{или} \quad \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 \ll 1. \quad (6)$$

Как видно, это более слабое условие, чем предыдущее (5).

Теперь заметим, что при вычислении амплитуды рассеяния по формулам (2) и (3) вторым слагаемым в выражении (2) следует пренебречь. Это связано с тем, что оно второго порядка малости по параметру $Z\alpha$, т. е. вносит такой же вклад, как и первое слагаемое в (2) во втором порядке теории возмущений и поэтому находится за пределами точности рассматриваемого приближения. Учитывая высказанные соображения и используя значение интеграла

$$\int \frac{1}{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r = \frac{4\pi}{q^2},$$

находим амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния бесспиновой частицы в электростатическом кулоновском поле:

$$f_B = -\frac{2Zee_1\varepsilon}{\hbar^2 c^2 q^2}, \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \approx \left(\frac{Zee_1}{2v_0 p_0}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (7)$$

сравнить с формулой Резерфорда нерелятивистской теории.

15.18. Амплитуда рассеяния заряженной бесспиновой частицы в электростатическом поле с потенциалом $\varphi(r)$ в борновском приближении описывается выражением

$$f_B = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U_{\text{эф}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r, \quad (1)$$

где эффективная потенциальная энергия

$$U_{\text{эф}} = \frac{e\varepsilon}{mc^2} \varphi(r) - \frac{1}{2mc^2} (e\varphi(r))^2 \quad (2)$$

(общие соображения по поводу формул (1), (2) и условий применимости борновского приближения в релятивистском случае см. в предыдущей задаче).

В ультрарелятивистском случае, когда $\varepsilon \approx pc \rightarrow \infty$, вторым слагаемым в выражении (2) можно пренебречь и амплитуда рассеяния оказывается равной

$$f_B \approx -\frac{ep}{2\pi\hbar^2 c} \int \varphi(r) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r \equiv -\frac{ep}{2\pi\hbar^2 c} \tilde{\varphi}(q).$$

Соответственно сечение рассеяния описывается выражением

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega = \frac{e^2}{4\pi\hbar^2 c^2} \int_0^{4\rho^2/\hbar^2} |\tilde{\varphi}(q)|^2 dq^2 \quad (3)$$

(напомним, что $d\Omega = \frac{\pi\hbar^2}{\rho^2} dq^2$).

При $\rho \rightarrow \infty$ верхний предел интегрирования в (3) можно положить равным бесконечности, так что сечение рассеяния $\sigma(\varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow \infty$ является постоянной величиной (в нерелятивистском случае оно убывает $\sigma \propto E^{-1} \rightarrow 0$ при $E \rightarrow \infty$, см. 13.2). Это связано с тем, что согласно (2) взаимодействие частицы с электростатическим полем возрастает при увеличении ее энергии.

Применимость борновского приближения в рассматриваемой задаче определяется первым из выражений (4) предыдущей задачи и требует выполнения неравенства $|e\varphi_0| \ll \hbar c/a$, где φ_0 и a — характерные значения потенциала и радиус его действия. В «сильном» электростатическом поле, при нарушении этого условия, борновское приближение неприменимо. Однако вывод о постоянстве сечения рассеяния при $\varepsilon \rightarrow \infty$ сохраняется и в этом случае. При этом сечение рассеяния может быть рассчитано по квазиклассической формуле

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow \infty} = 4\pi \int_0^\infty \left\{ 1 - \cos \left[\frac{e}{\hbar c} \int_{-\infty}^\infty \varphi(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz \right] \right\} \rho d\rho, \quad (4)$$

представляющей обобщение результата 13.51 на рассматриваемый релятивистский случай (для такого обобщения в формуле из 13.51 надо заменить $U(r)$ на $U_{эф}$ и вместо $\hbar k$ подставить $p \approx \varepsilon/c$, см. предыдущую задачу).

В заключение отметим, что для справедливости полученных результатов требуется, чтобы потенциал на больших расстояниях убывал быстрее, чем $\propto 1/r^2$; в противном случае сечение рассеяния обращается в бесконечность, как и в нерелятивистской теории, из-за расходимости интеграла в выражении (3) на нижнем пределе (за счет малых углов рассеяния).

15.19. Стационарное волновое уравнение для релятивистской бесспиновой частицы во внешнем постоянном скалярном поле можно записать в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right\} \Psi = \frac{p_0^2}{2m} \Psi \quad (c^2 p_0^2 = \varepsilon^2 - m^2 c^4),$$

тождественном по форме нерелятивистскому уравнению Шрёдингера. Ввиду такой аналогии для амплитуды рассеяния можно не-

последственно воспользоваться известными результатами нерелятивистской теории (сравнить с 15.17). В борновском приближении

$$f_B(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) e^{-iqr} dV \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}(q).$$

Соответственно сечение рассеяния (сравнить с предыдущей задачей)

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{m^2}{4\pi\hbar^2 p_0^2} \int_0^{4p_0^2/\hbar^2} |\tilde{U}(q)|^2 dq^2$$

в ультрарелятивистском пределе ($p_0 \approx \varepsilon/c$) определяется выражением

$$\sigma(\varepsilon) \approx \frac{m^2 c^2}{4\pi\hbar^2 \varepsilon^2} \int_0^\infty |\tilde{U}(q)|^2 dq^2 \approx \frac{1}{\varepsilon^2}. \quad (1)$$

Условие применимости борновского приближения: $U_0 \ll \hbar p_0 / ma$, где U_0 , a — характерная величина потенциала и радиус его действия.

15.20. Гамильтониан частицы $\hat{H} = c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\beta$, см. (XV.4, 5). При вычислении коммутаторов удобно воспользоваться результатом 1.4 и учесть то обстоятельство, что два оператора, один из которых (\hat{p} , \hat{l} и т. д.) действует на пространственные переменные, а другой ($\hat{\alpha}$, $\hat{\Sigma}$ и т. д.) — на спиновые, коммутируют друг с другом.

1) $[\hat{p}, \hat{H}] = 0;$

2) $[\hat{l}_i, \hat{H}] = [\hat{l}_i, c\hat{\alpha}\hat{p}] = c\alpha_k [\hat{l}_i, \hat{p}_k] = ic\varepsilon_{ikl}\alpha_k \hat{p}_l \neq 0;$

3) $[\hat{l}^2, \hat{H}] = [\hat{l}_i \hat{l}_i, \hat{H}] = \hat{l}_i [\hat{l}_i, \hat{H}] + [\hat{l}_i, \hat{H}] \hat{l}_i =$
 $= ic\varepsilon_{ikl}\alpha_k (\hat{l}_i \hat{p}_l + \hat{p}_l \hat{l}_i) \neq 0;$

4) Так как

$$[\Sigma_i, \alpha_k] = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \sigma_k - \sigma_k \sigma_i \\ \sigma_i \sigma_k - \sigma_k \sigma_i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2i\varepsilon_{ikl}\sigma_l \\ 2i\varepsilon_{ikl}\sigma_l & 0 \end{pmatrix} = 2i\varepsilon_{ikl}\alpha_l$$

и $[\Sigma_i, \beta] = 0$ то

$$[\hat{s}_i, \hat{H}] = \frac{c}{2} [\Sigma_i, \alpha_k] \hat{p}_k = ic\varepsilon_{ikl}\alpha_l \hat{p}_k \equiv -ic\varepsilon_{ikl}\alpha_k \hat{p}_l;$$

$$5) \Sigma^2 = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & \sigma^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = 3, \quad \text{поэтому}$$

оператор $\hat{s}^2 = \frac{1}{4} \Sigma^2 = \frac{3}{4}$ и, очевидно, коммутирует с \hat{H} .

Воспользовавшись значениями коммутаторов 1), 2), 4), находим

$$6) [\hat{j}_i, \hat{H}] = 0; \quad 7) [j^2, \hat{H}] = 0;$$

$$8) [\Sigma \hat{p}, \hat{H}] = [\Sigma_i, \hat{H}] \hat{p}_i + \Sigma_i [\hat{p}_i, \hat{H}] = 2i \varepsilon_{ikl} \alpha_i \hat{p}_k \hat{p}_l = 0.$$

$$9) \text{ Так как } \hat{I} \hat{p} = -\hat{p} \hat{I}, \text{ то } [\hat{I}, \hat{H}] = [\hat{I}, c \alpha \hat{p}] = -2c \alpha \hat{p} \hat{I};$$

$$10) [\hat{P}, mc^2 \beta] = 0, \quad [\hat{P}, \hat{H}] = [\beta \hat{I}, c \alpha \hat{p}] = c \beta \hat{I} \alpha \hat{p} - c \alpha \hat{p} \beta \hat{I} = 0;$$

$$11) [\gamma_5, \hat{H}] = 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{и для частицы с массой } m = 0$$

этот коммутатор равен нулю).

В нерелятивистском случае первые девять операторов коммутируют с гамильтонианом свободной частицы $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$. В релятивистском случае ситуация несколько иная. Сохраняющаяся коммутативность оператора импульса \hat{p} с гамильтонианом свободной частицы является отражением свойства однородности пространства, так же как коммутативность оператора суммарного момента частицы $\hat{j} = \hat{I} + \hat{s}$ с \hat{H} — следствие его изотропии. Однако в отдельности операторы \hat{I} и \hat{s} не коммутируют с гамильтонианом. Это означает, что в релятивистском случае имеется некоторая кинематическая корреляция между возможным спиновым состоянием частицы и ее орбитальным движением (сравнить с 15.23). Об этом свидетельствует также и некоммутативность оператора квадрата орбитального момента \hat{I}^2 с \hat{H} . Тем не менее, согласно 1) и 8), спиральность по-прежнему является «хорошим» квантовым числом. Коммутативность оператора отражения $\hat{P} = \beta \hat{I}$ с гамильтонианом свободной частицы является отражением зеркальной симметрии свободного пространства (неразличимости «правого» и «левого»). При этом ввиду отмеченной выше корреляции спинового и орбитального состояний частицы оператор отражения уже не сводится лишь к инверсии координат \hat{I} , а «дополняется» преобразованием спинового состояния частицы.

15.21. Решения уравнения Дирака для свободной частицы, соответствующие определенным значениям энергии ε и импульса p , имеют вид

$$\Psi_{p\varepsilon}(\mathbf{r}, t) = u(p, \varepsilon) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t) \right], \quad (1)$$

где биспинор $u(\mathbf{p}, \varepsilon)$ удовлетворяет стационарному уравнению Дирака, см. (XV. 4),

$$(c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} + mc^2\beta) u(\mathbf{p}, \varepsilon) = \varepsilon u(\mathbf{p}, \varepsilon), \quad (2)$$

или, для двухкомпонентных спиноров,

$$\begin{aligned} c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\chi + mc^2\varphi &= \varepsilon\varphi, \\ c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi - mc^2\chi &= \varepsilon\chi. \end{aligned} \quad u(\mathbf{p}, \varepsilon) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Второе из уравнений (3) дает

$$\chi = \frac{c}{\varepsilon + mc^2} \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi, \quad (4)$$

и после подстановки этого выражения в первое из уравнений (3) получаем (с учетом соотношения $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})^2 = p^2$):

$$\frac{c^2 p^2}{\varepsilon + mc^2} \varphi = (\varepsilon - mc^2) \varphi.$$

Отсюда следует, что $\varepsilon = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$. При этом спинор φ остается неопределенным и может быть выбран произвольным образом, причем двумя независимыми способами (для каждого из двух различающихся знаком значений ε).

Таким образом, при фиксированном импульсе \mathbf{p} существует четыре независимых решения уравнения Дирака вида (1), для которых биспиноры $u(\mathbf{p}, \varepsilon)$ равны

$$\begin{aligned} u(\mathbf{p}, \varepsilon = E) &= \\ &= \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{E + mc^2} \varphi_1 \end{pmatrix}, \quad u(\mathbf{p}, \varepsilon = -E) = \begin{pmatrix} \varphi_2 \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{-E + mc^2} \varphi_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $E = + \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \geq mc^2$.

Существование решений уравнения Дирака, отвечающих формально отрицательной энергии частицы, ассоциируется с состояниями античастицы, см. 15.27. Именно в связи с «теорией дырок», сформулированной Дираком для наглядной интерпретации состояний с отрицательной энергией, и возникла концепция античастицы.

Для конкретизации вида спинора φ , а с ним и в.ф. (1), (5), воспользуемся коммутативностью эрмитова оператора $\hat{\Lambda} = \hat{\Sigma}\hat{\mathbf{p}}$ с операторами $\hat{\mathbf{p}}$ и \hat{H} и введем полную систему с. ф. $\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda}$. При этом из уравнения $\hat{\Lambda}\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda} = \Lambda\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda}$, где

$$\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda} = u(\mathbf{p}, \varepsilon, \Lambda) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)\right),$$

$$u(\mathbf{p}, \varepsilon, \Lambda) = \begin{pmatrix} \varphi_\Lambda \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi_\Lambda \end{pmatrix},$$

следует

$$(\sigma p) \varphi_{\Lambda} = \Lambda \varphi_{\Lambda}, \quad \text{или} \quad \left(\frac{\sigma}{2} p \right) \varphi_{\Lambda} = \lambda \varphi_{\Lambda},$$

$$p = \frac{p}{|p|}, \quad \Lambda = 2\lambda |p|. \quad (6)$$

Решения уравнения (6) были получены ранее в нерелятивистской теории спина, см. 5.3 и 5.20; напомним, что состояния частицы с определенным значением λ (с.з. λ равны $\pm 1/2$) называют спиральными.

В заключение отметим, что при зарядовом сопряжении спиральность λ не изменяется, см. 15.27 (в отличие от значений p и ε , изменяющих знак; отмеченное обстоятельство наглядно проявляется в теории дырок).

15.22. Подставив в известные выражения (XV.7)

$$j = c\Psi^* \alpha \Psi \equiv ic \bar{\Psi} \gamma \Psi, \quad \rho = \Psi^* \Psi \equiv \bar{\Psi} \beta \Psi \quad (1)$$

волновую функцию состояния дираковской частицы с определенным импульсом p и энергией $\varepsilon = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \geq mc^2$

$$\Psi_{pe} = u(p, \varepsilon) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p r - \varepsilon t) \right], \quad (2)$$

где биспинор u равен (см. предыдущую задачу)

$$u = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c \sigma p}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix}, \quad N = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2\varepsilon}} \quad (3)$$

(значение N выбрано таким образом, что нормировка биспинора u совпадает с нормировкой спинора φ , т. е. $u^* u = \varphi^* \varphi$; напомним, что $u^* = N(\varphi^*, \chi^*) = N\left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c \sigma p}{\varepsilon + mc^2}\right)$, $(\sigma p)^2 = p^2$),

получаем

$$\rho = \Psi^* \Psi = u^* u = \varphi^* \varphi, \quad (4)$$

$$j = c\Psi^* \alpha \Psi = cu^* \alpha u =$$

$$\begin{aligned} &= cN^2 \left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c \sigma p}{\varepsilon + mc^2} \right) \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c \sigma p}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix} = \\ &= cN^2 \left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c \sigma p}{\varepsilon + mc^2} \right) \begin{pmatrix} \frac{c \sigma (\sigma p)}{\varepsilon + mc^2} \varphi \\ \sigma \varphi \end{pmatrix} = \\ &= \frac{c^2 N^2}{\varepsilon + mc^2} \varphi^* [\sigma (\sigma p) + (\sigma p) \sigma] \varphi. \end{aligned} \quad (5)$$

Отсюда, воспользовавшись соотношением

$$\sigma_i (\sigma \mathbf{p}) + (\sigma \mathbf{p}) \sigma_i = (\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i) p_k = 2\delta_{ik} p_k = 2p_i,$$

следующим из свойств матриц Паули, имеем

$$\mathbf{j} = c\Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi = \frac{2c^2 N^2}{e + mc^2} \mathbf{p} \Phi^* \Phi = \frac{c^2 \mathbf{p}}{e} \Phi^* \Phi = \mathbf{v} \Phi^* \Phi = \rho \mathbf{v}, \quad (6)$$

где \mathbf{v} — скорость классической релятивистской частицы, обладающей импульсом \mathbf{p} .

В заключение обсудим вопрос об операторе скорости $\hat{\mathbf{v}}$ дираковской частицы. Формальное вычисление согласно (VI.4) коммутатора $[\hat{H}, \mathbf{r}]$ дает

$$\mathbf{v} = \hat{\mathbf{r}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \mathbf{r}] = c\boldsymbol{\alpha}. \quad (7)$$

В связи с этим равенством напомним, что введение оператора

$\hat{f} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}]$ как оператора производной по времени физической величины f (для которой $\partial f / \partial t = 0$) в нерелятивистской теории связано с использованием соотношения, см. [1, § 9],

$$\frac{d}{dt} \langle f \rangle \equiv \left\langle \frac{df}{dt} \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* [\hat{H}, \hat{f}] \Psi d\tau \quad (8)$$

и непосредственно следует из него в случае отсутствия каких-либо существенных дополнительных ограничений на в.ф. Ψ состояний системы. В случае релятивистской частицы, удовлетворяющей уравнению Дирака, как раз и возникают подобные ограничения. Они связаны с тем, что непосредственный физический смысл волновой функции состояния частицы имеет лишь суперпозиция положительно-частотных решений уравнений Дирака (сравнить с 15.1 для бесспиновой частицы). Такую суперпозицию Ψ^+ можно выделить из уже произвольного решения уравнения Дирака с помощью проекционного оператора \hat{P}_+ для решений с положительной энергией:

$$\Psi^+ = \hat{P}_+ \Psi, \quad \hat{P}_+ = \frac{c\hat{\mathbf{p}} + mc^2\beta + \hat{\epsilon}}{2\hat{\epsilon}},$$

$$\hat{\epsilon} = \epsilon(\hat{\mathbf{p}}) = \sqrt{\hat{\mathbf{p}}^2 c^2 + m^2 c^4}, \quad (9)$$

при этом $\hat{P}_+^2 = \hat{P}_+$. Воспользовавшись свойствами матриц $\boldsymbol{\alpha}$ и β :

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik}, \quad \beta \alpha_i + \alpha_i \beta = 0,$$

$$\alpha_i \alpha_k \alpha_l = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \sigma_k \sigma_l \\ \sigma_i \sigma_k \sigma_l & 0 \end{pmatrix} = -i\epsilon_{ikl} \gamma_5 + \delta_{ik} \alpha_l - \delta_{il} \alpha_k + \delta_{kl} \alpha_i,$$

$$\hat{p}_+ \alpha \hat{p}_+ = \frac{c\hat{p}}{\hat{\epsilon}} \hat{p}_+. \quad (10)$$

Теперь, сделав в выражении (8) подстановки

$$\hat{f} \rightarrow \mathbf{r}, \quad \Psi \rightarrow \Psi_+ \equiv \hat{p}_+ \Psi, \quad \hat{H} = c\alpha\hat{p} + mc^2\beta$$

и выполнив, воспользовавшись соотношением (10), следующее преобразование:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{v}} \rangle &= \langle \Psi_+ | \hat{p}_+ + c\alpha\hat{p}_+ | \Psi_+ \rangle = \langle \Psi_+ | \frac{c^2\hat{p}}{\hat{\epsilon}} \hat{p}_+ | \Psi_+ \rangle = \\ &= \langle \Psi_+ | \frac{c^2\hat{p}}{\hat{\epsilon}} | \Psi_+ \rangle, \quad (11) \end{aligned}$$

приходим к естественному соотношению $\hat{\mathbf{v}} = c^2\hat{p}/\hat{\epsilon}$ между операторами скорости, импульса и энергии свободной релятивистской частицы (в частности, в импульсном представлении получаем $\hat{\mathbf{v}} = c^2\mathbf{p}/\epsilon(p)$).

15.23. Волновая функция рассматриваемого состояния имеет вид

$$\Psi = u(\mathbf{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \epsilon t)\right],$$

где биспинор $u(\mathbf{p})$ равен

$$u(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\epsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix}, \quad N = \sqrt{\frac{\epsilon + mc^2}{2\epsilon}}$$

(см. 15.21; использована нормировка $u^*u = \varphi^*\varphi = 1$).

Среднее значение вектора спина вычисляется по формуле

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{s}} &= \frac{1}{2} \frac{u^* \Sigma u}{u^* u} = \\ &= \frac{N^2}{2} \left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\epsilon + mc^2} \right) \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\epsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix} = \\ &= \frac{N^2}{2} \varphi^* \left\{ \sigma + \frac{c^2}{(\epsilon + mc^2)^2} (\sigma\mathbf{p}) \sigma (\sigma\mathbf{p}) \right\} \varphi = \\ &= \frac{N^2}{2} \varphi^* \left\{ \sigma + \frac{p^2 c^2}{(\epsilon + mc^2)^2} \sigma_z \sigma \sigma_z \right\}, \quad \mathbf{p} = (0, 0, p). \quad (1) \end{aligned}$$

Отсюда, воспользовавшись свойствами (V. 3) матриц Паули, получаем

$$\begin{aligned}\bar{s}_x &= \frac{N^2}{2} \varphi^* \left\{ \sigma_x - \frac{p^2 c^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} \sigma_x \right\} \varphi = \frac{mc^2}{2\varepsilon} \varphi^* \sigma_x \varphi, \\ \bar{s}_y &= \frac{mc^2}{2\varepsilon} \varphi^* \sigma_y \varphi, \quad \bar{s}_z = \frac{1}{2} \varphi^* \sigma_z \varphi.\end{aligned}\quad (2)$$

Заметим, что вектор $\mathbf{s}_0 = \frac{1}{2} \varphi^* \boldsymbol{\sigma} \varphi$ имеет смысл среднего вектора спина в рассматриваемом состоянии, но уже в системе координат, в которой частица покоится, см. 15.25. Поэтому полученные результаты (2) наглядно можно охарактеризовать как своеобразное *сокращение* поперечных составляющих вектора $\bar{\mathbf{s}}$ при лоренцевых преобразованиях. При этом для ультрарелятивистской частицы, $\varepsilon \gg mc^2$, вектор $\bar{\mathbf{s}}$ оказывается направленным вдоль импульса частицы (сравнить со случаем частицы с массой покоя $m = 0$, рассмотренным в 15.24).

15.24. Для рассматриваемого унитарного преобразования

$$\hat{U} = \hat{U}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \text{ находим:}$$

$$\beta' = \hat{U} \beta \hat{U}^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\Sigma' = \hat{U} \Sigma \hat{U}^+ = \Sigma,$$

$$\alpha' = \hat{U} \alpha \hat{U}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & -\sigma \end{pmatrix}.$$

Таким образом, оператор вектора спина в новом представлении сохраняет свой прежний вид $\frac{1}{2} \Sigma$, а уравнение Дирака в новом представлении

$$\begin{aligned}(c\alpha' \hat{\mathbf{p}} + mc^2 \beta') \Psi' &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi', \quad \Psi' = \hat{U} \Psi = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \varphi + \chi \\ \varphi - \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix},\end{aligned}$$

записанное через двухкомпонентные спиноры ξ и η , принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi = c\sigma \hat{\mathbf{p}} \xi + mc^2 \eta, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \eta = -c\sigma \hat{\mathbf{p}} \eta + mc^2 \xi. \quad (1)$$

Обсудим более подробно случай частицы с массой покоя $m = 0$ (нейтрино). Из уравнений (1) видно, что в этом случае новое представление особенно удобно, так как спиноры ξ и η

подчиняются независимым уравнениям. Более того, эти спиноры преобразуются независимо друг от друга и при лоренцевых преобразованиях (сравнить с 15.25). Таким образом, при $m = 0$ каждое из уравнений (1) в отдельности является релятивистски инвариантным уравнением — *уравнением Вейля*. Однако такое уравнение неинвариантно относительно пространственной инверсии, в отличие от уравнения Дирака. Это связано с тем, что при инверсии спиноры ξ и η «переставляются» местами, как это следует из преобразования $\tilde{\Psi}' = \hat{P}\Psi' = \hat{I}\beta'\Psi'$ с учетом вида матрицы β' . Отмеченная неинвариантность уравнений (1) проявляется в том, что описываемые их решениями состояния частицы с энергией $\epsilon = pc > 0$ отвечают определенным, но противоположным по знаку значениям спиральности λ , равным $+1/2$ и $-1/2$ соответственно для спиноров ξ и η (античастица имеет противоположное значение спиральности, при этом каждое из уравнений (1) CP -инвариантно).

В заключение заметим, что совокупность существующих экспериментальных данных свидетельствует о том, что нейтрино проявляет себя как частица с отрицательной спиральностью.

15.25. В системе координат K , в которой частица покоится и имеет энергию $\epsilon = mc^2$, ее спиновое состояние описывается биспинором $u(0) = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ 0 \end{pmatrix}$, где φ_0 — некоторый двухкомпонентный спинор.

В системе K' , движущейся относительно системы K со скоростью $-\mathbf{v}$, частица имеет скорость \mathbf{v} и импульс $\mathbf{p} = m\mathbf{v}/\sqrt{1 - (v/c)^2}$, а ее спиновое состояние описывается биспинором $u(\mathbf{p})$, выражающимся через $u(0)$ по известной формуле преобразования Лоренца для биспиноров:

$$u(\mathbf{p}) \equiv u' = \hat{S}u(0), \quad (1)$$

$$\hat{S} = \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha\mathbf{n}\theta\right) = \text{ch}\frac{\theta}{2} - \text{sh}\frac{\theta}{2}\alpha\mathbf{n} \quad \left(\text{th}\theta = \frac{v}{c}\right), \quad (2)$$

где $\mathbf{n} = -\mathbf{v}/v$ — единичный вектор скорости системы K' относительно K .

Воспользовавшись соотношениями

$$\begin{aligned} \text{th}\frac{\theta}{2} &= \frac{\text{th}\theta}{1 + \sqrt{1 - \text{th}^2\theta}} = \frac{v/c}{1 + \sqrt{1 - (v/c)^2}} = \frac{pc}{\epsilon(\mathbf{p}) + mc^2}, \\ \text{ch}\frac{\theta}{2} &= \sqrt{\frac{1 + \text{ch}\theta}{2}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \text{th}^2\theta}}\right)} = \\ &= \sqrt{\frac{\epsilon(\mathbf{p}) + mc^2}{2mc^2}}, \end{aligned}$$

по формулам (1) и (2) получаем

$$u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \left(\operatorname{ch} \frac{\theta}{2}\right) \varphi_0 \\ \left(\operatorname{sh} \frac{\theta}{2}\right) \frac{\sigma \mathbf{v}}{v} \varphi_0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \frac{c\sigma \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi_0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Это выражение для биспинора $u(\mathbf{p})$ согласуется с видом общего решения уравнения Дирака, найденного в 15.21. В этом смысле существенным элементом полученного результата является установление того факта, что спинор φ в биспиноре $u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ во всех лоренцевых системах одинаков (с точностью до нормировки) и равен φ_0 .

Используя нормировку $\varphi_0^* \varphi_0 = 1$, получаем среднее значение вектора спина частицы в системе K' , где она имеет импульс \mathbf{p} , в виде

$$\bar{s}_{\mathbf{p}} = \frac{\frac{1}{2} u^* \Sigma u}{u^* u} = \frac{\varepsilon + mc^2}{4\varepsilon} \varphi_0^* \left\{ \sigma + \frac{c^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} (\sigma \mathbf{p}) \sigma (\sigma \mathbf{p}) \right\} \varphi_0. \quad (4)$$

Его связь со средним значением вектора спина в системе покоя частицы, равным $\bar{s}_0 = \frac{1}{2} \varphi_0^* \sigma \varphi_0$, легко установить, если направить ось z вдоль вектора \mathbf{p} и воспользоваться свойствами (V.3) матриц Паули:

$$\bar{s}_{\mathbf{p}, x} = \frac{mc^2}{\varepsilon} \bar{s}_{0, x}; \quad \bar{s}_{\mathbf{p}, y} = \frac{mc^2}{\varepsilon} \bar{s}_{0, y}; \quad \bar{s}_{\mathbf{p}, z} = \bar{s}_{0, z}, \quad (5)$$

сравнить с 15.23.

15.26. Имея в виду, что $\Psi_{\mathbf{p}\lambda} = u_{\lambda}(\mathbf{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)\right]$,

$$u_{\lambda}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi_{\lambda} \\ \frac{c\sigma \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi_{\lambda} \end{pmatrix}, \quad u_{\lambda}^*(\mathbf{p}) = \left(\varphi_{\lambda}^*, \varphi_{\lambda}^* \frac{c\sigma \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \right),$$

находим

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{p}\lambda'}^* \Psi_{\mathbf{p}\lambda} &= u_{\lambda'}^* u_{\lambda} = \varphi_{\lambda'}^* \left[1 + \frac{c^2 (\sigma \mathbf{p})^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} \right] \varphi_{\lambda} = \\ &= \frac{2\varepsilon}{\varepsilon + mc^2} \varphi_{\lambda'}^* \varphi_{\lambda} \approx \delta_{\lambda'\lambda}, \end{aligned}$$

что доказывает ортогональность рассматриваемых спиновых состояний релятивистской частицы, отвечающих различным значениям λ (при этом использована ортогональность $\varphi_{\lambda'}^* \varphi_{\lambda} = \delta_{\lambda'\lambda}$ двухкомпонентных спиноров как с. ф. эрмитова оператора $\sigma \mathbf{n}$).

Ответы на вопросы, поставленные в условии данной задачи, становятся очевидными, если учесть результат предыдущей задачи. Согласно последней спинор φ в биспиноре $u(p) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ описывающем одно и то же физическое состояние частицы с определенным импульсом, в различных инерциальных системах координат одинаков (с точностью до нормировочного множителя).

В системе покоя частицы биспинор имеет вид $u(0) = \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$ и соответственно $u_\lambda(0) = \begin{pmatrix} \varphi_\lambda \\ 0 \end{pmatrix}$. Но в системе покоя частицы уравнение $(\sigma \tilde{n}) \varphi_\lambda = \lambda \varphi_\lambda$ эквивалентно

$$(\Sigma \tilde{n}) u_\lambda(0) = \lambda u_\lambda(0), \quad (1)$$

т. е. является уравнением на собственные функции оператора $\Sigma \tilde{n} = 2\hat{s}\tilde{n}$ — удвоенной проекции спина на ось, направленную вдоль вектора \tilde{n} . Таким образом, наглядный смысл вектор \tilde{n} , фигурирующий в определении биспинора $u_\lambda(p)$, имеет непосредственно в исходной системе координат, в которой импульс частицы равен p , а в системе, где она покоится, определяя направление, на которое проекция спина частицы имеет определенное, равное $\lambda/2$ значение. Далее, вектор $\frac{1}{2} \varphi^* \sigma \varphi$ определяет среднее значение вектора спина в системе покоя частицы (во избежание недоразумений подчеркнем, что в задаче рассматриваются состояния частицы с определенным значением импульса и именно поэтому имеет смысл говорить о системе покоя частицы).

В заключение заметим, что рассматриваемой задаче о классификации спиновых состояний частицы с определенным импульсом по квантовому числу λ можно придать ковариантную форму. Для этого введем оператор

$$\hat{\lambda} = i\gamma_5 \hat{v} \equiv i\gamma_5 (\gamma v + \gamma_4 v_4) = \begin{pmatrix} \sigma v & -v_0 \\ v_0 & -\sigma v \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $v_i = (v, v_4)$ — некоторый единичный 4-вектор, так что $v_i^2 = v^2 + v_4^2 = 1$, ортогональный 4-импульсу частицы $p_i = (p, i\epsilon/c)$, т. е. $v_i p_i = \mathbf{v}p - v_0 \epsilon/c = 0$, а $v_4 = i v_0$. При этом уравнение

$$\hat{\lambda} u_\lambda(p) = \lambda u_\lambda(p) \quad (3)$$

эквивалентно уравнению $(\sigma \tilde{n}) \varphi_\lambda = \lambda \varphi_\lambda$, где связь трехмерного вектора \tilde{n} с 4-вектором v_i определяется тем условием, что в системе покоя частицы v_i имеет вид $\tilde{v}_i = (\tilde{n}, 0)$. Действительно,

учитывая выражения для биспинора $u_\lambda(\mathbf{p})$ и оператора $\hat{\lambda}$, нахо-
дим

$$\hat{\lambda}u_\lambda \equiv \begin{pmatrix} \sigma \left(\mathbf{v} - \frac{c\mathbf{v}_0\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \right) \varphi_\lambda \\ \left(v_0 - \frac{c(\sigma\mathbf{v})(\sigma\mathbf{p})}{\varepsilon + mc^2} \right) \varphi_\lambda \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Далее, выразив \mathbf{v} , v_0 через компоненты $(\tilde{\mathbf{n}}, 0)$ с помощью преобразования Лоренца для 4-вектора:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\perp + \mathbf{v}_\parallel = \tilde{\mathbf{n}}_\perp + \frac{\varepsilon}{mc^2} \tilde{\mathbf{n}}_\parallel, \quad v_0 = \frac{c}{\varepsilon} (\mathbf{v}\mathbf{p}),$$

где знаки \perp , \parallel соответствуют перпендикулярным и параллельным составляющим векторов по отношению к вектору $\mathbf{p}/|\mathbf{p}|$, получаем

$$\mathbf{v} - \frac{c\mathbf{v}_0\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} = \mathbf{v} - \frac{v_0(\varepsilon - mc^2)\mathbf{p}}{c\rho^2} = \mathbf{v}_\perp + \frac{mc^2}{\varepsilon} \mathbf{v}_\parallel = \tilde{\mathbf{n}}.$$

При этом, как видно, верхний спинор в биспиноре (4) совпадает с $(\tilde{\sigma}\tilde{\mathbf{n}})\varphi_\lambda$. Аналогично убеждаемся в справедливости соотношения

$$\left(v_0 - \frac{c(\sigma\mathbf{v})(\sigma\mathbf{p})}{\varepsilon + mc^2} \right) \varphi_\lambda = \frac{c(\sigma\mathbf{p})}{\varepsilon + mc^2} (\sigma\tilde{\mathbf{n}})\varphi_\lambda$$

для нижнего спинора в (4). Из приведенных равенств и следует эквивалентность уравнения (3) уравнению $(\tilde{\sigma}\tilde{\mathbf{n}})\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda$. Заметим, наконец, что такая эквивалентность уравнений очевидна из следующих соображений. Введенный оператор $\hat{\lambda}$ является скалярным (точнее, псевдоскалярным) оператором по отношению к преобразованию Лоренца. Соответственно из ковариантности уравнения (3) вытекает, что выполнение его в одной из систем отсчета автоматически обеспечивает справедливость уравнения и в любой лоренцевой системе; а в системе покоя частицы уравнение (3) имеет вид $(\tilde{\sigma}\tilde{\mathbf{n}})\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda$.

15.27. Решения уравнения Дирака, отвечающие определенным значениям импульса и энергии частицы, имеют вид ⁶⁾, см. 15.21,

$$\begin{aligned} \Psi_{pe}^\pm &= \begin{pmatrix} \varphi_p \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon \pm mc^2} \varphi_p \end{pmatrix} e^{\pm \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)} = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon \mp mc^2} \chi_p \\ \chi_p \end{pmatrix} e^{\pm \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)}, \quad (1) \end{aligned}$$

⁶⁾ Обращаем внимание на соответствие таких обозначений использованным ранее в случае бесспиновой частицы, см. 15.1.

где $\varepsilon = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \geq mc^2$. При этом решение Ψ_{pe}^+ имеет физический смысл волновой функции состояния частицы с импульсом p и энергией ε .

Решение Ψ_{pe}^- , отвечающее формально отрицательной энергии и импульсу $-p$, не имеет непосредственного смысла в. ф. состояния частицы. Такое решение сопоставляется античастице, причем в. ф. античастицы $\Psi_c^+ = \hat{C}\Psi^-$ получается в результате применения операции зарядового сопряжения \hat{C} к функции Ψ_{pe}^- . Это преобразование при используемом выборе (XV.5) матриц Дирака записывается в явном виде следующим образом:

$$\Psi_c^+ = \hat{C}\Psi^- \equiv \gamma_2 \gamma_4 \bar{\Psi}^- = \gamma_2 \gamma_4 (\Psi^{-*} \beta), \quad (2)$$

или более подробно, с указанием биспинорных индексов:

$$\begin{aligned} (\Psi_c^+)_\alpha &= (\gamma_2 \gamma_4)_{\alpha\delta} (\Psi^{-*} \beta)_\delta = (\gamma_2 \gamma_4)_{\alpha\delta} (\Psi^{-*})_\mu \beta_{\mu\delta} = \\ &= (\gamma_2 \gamma_4)_{\alpha\delta} \beta_{\delta\mu} (\Psi^{-*})_\mu = (\gamma_2 \gamma_4 \beta)_{\alpha\mu} (\Psi^{-*})_\mu = (\gamma_2)_{\alpha\mu} (\Psi^{-*})_\mu \end{aligned} \quad (3)$$

(здесь использовано, что $\beta = \gamma_4$, $\beta^2 = 1$, $\beta_{\mu\delta} = \beta_{\delta\mu}$).

Воспользовавшись соотношениями

$$\begin{aligned} \Psi_{pe}^{-*} &= \begin{pmatrix} \frac{c\sigma^* p}{\varepsilon + mc^2} \chi_p^* \\ \chi_p^* \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pr - \varepsilon t)}, \quad \gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma^* &= (\sigma_1, -\sigma_2, \sigma_3), \quad \sigma_2 \sigma^* = -\sigma \sigma_2, \end{aligned}$$

согласно (3) находим в. ф. состояния античастицы, соответствующего «нефизическому» решению Ψ_{pe}^- уравнения Дирака:

$$\begin{aligned} \Psi_c^+ &= \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{c\sigma^* p}{\varepsilon + mc^2} \chi_p^* \\ \chi_p^* \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pr - \varepsilon t)} = \\ &= \begin{pmatrix} -i\sigma_2 \chi_p^* \\ -i \frac{c\sigma p}{\varepsilon + mc^2} \sigma_2 \chi_p^* \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pr - \varepsilon t)}. \end{aligned} \quad (4)$$

В этом состоянии античастица имеет импульс p и энергию $\varepsilon = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \geq mc^2$. Обозначив $\varphi_{c, p} \equiv -i\sigma_2 \chi_p^*$, перепишем выражение (4) в виде

$$\Psi_{c, pe}^+ = \begin{pmatrix} \varphi_{c, p} \\ \frac{c\sigma p}{\varepsilon + mc^2} \varphi_{c, p} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pr - \varepsilon t)}, \quad (5)$$

что по форме совпадает, естественно, с волновой функцией аналогичного состояния частицы с импульсом p и энергией ϵ .

Волновая функция состояния античастицы с определенной спиральностью $\Psi_{c, p\epsilon\lambda}^+$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{2} (\Sigma p) \Psi_{c, p\epsilon\lambda}^+ = \lambda \Psi_{c, p\epsilon\lambda}^+, \quad p = p/|p|,$$

из которого следует

$$\frac{1}{2} (\sigma p) \varphi_{c, p\lambda} = \lambda \varphi_{c, p\lambda}. \quad (6)$$

Учитывая установленную выше связь спинора $\varphi_{c, p}$ в в. ф. античастицы со спинором χ_p^- в [решении Ψ_{pe}^- уравнения Дирака ($\varphi_{c, p} = -i\sigma_2 \chi_p^{-*}$)], замечаем, что уравнение (6) эквивалентно уравнению

$$-\frac{1}{2} (\sigma p) \chi_{p\lambda}^- = \lambda \chi_{p\lambda}^-$$

(во избежание недоразумения подчеркнем, что спинор χ_p^- соответствует решению уравнения Дирака с импульсом $-p$; поэтому оператором спиральности для него является $-\frac{1}{2} (\sigma p)$). Это означает, что при зарядовом сопряжении $\Psi_c^+ = \hat{C}\Psi^-$ квантовое число *спиральность* сохраняет свое значение (в то время как импульс и энергия изменяют знак; отмеченное свойство спиральности наглядно проявляется в «теории дырок», в которой античастица интерпретируется как дырка среди заполненных состояний частицы с отрицательной энергией).

15.28. Коммутативность эрмитова оператора $\gamma_5 = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

с гамильтонианом $\hat{H} = c\hat{\alpha}\hat{p} = c\begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}\hat{p}$ безмассовой дираковской частицы очевидна: $[\gamma_5, \hat{H}] = 0$.

Для выяснения физического смысла с.з. μ оператора γ_5 найдем общие с.ф. $\Psi_{p\epsilon\mu}$ коммутирующих друг с другом эрмитовых операторов \hat{H} , \hat{p} , γ_5 . Эти функции имеют вид

$$\Psi_{p\epsilon\mu} = \begin{pmatrix} \varphi_{p\mu} \\ \frac{c}{\epsilon} \sigma p \varphi_{p\mu} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} (p\mathbf{r} - \epsilon t)}, \quad \epsilon = \pm pc \quad (1)$$

(сравнить с 15.21), причем из уравнения $\gamma_5 \Psi_{p\epsilon\mu} = \mu \Psi_{p\epsilon\mu}$ следует

$$-\frac{c}{\epsilon} \sigma p \varphi_{p\mu} = \mu \varphi_{p\mu}, \quad -\varphi_{p\mu} = \mu \frac{c}{\epsilon} \sigma p \varphi_{p\mu}. \quad (2)$$

Отсюда $\mu^2 = 1$, т. е. собственные значения равны $\mu = \pm 1$ (что, впрочем, очевидно заранее, так как $\gamma_5^2 = 1$). Имея в виду соотношения (2) и равенство $(\sigma\mathbf{p})^2 = p^2 = \varepsilon^2/c^2$, замечаем, что уравнения

$$\gamma_5 \Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\mu} = \mu \Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\mu} \quad \text{и} \quad (\Sigma\mathbf{n}) \Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\mu} = -\mu \frac{\varepsilon}{|\varepsilon|} \Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\mu}, \quad (3)$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$, эквивалентны друг другу. Отсюда следует физический смысл величины $-\mu\varepsilon/|\varepsilon|$ как удвоенного значения 2λ спиральности состояния. Таким образом, для решений уравнения Дирака с положительной энергией $\varepsilon = pc > 0$ имеем $\mu = -2\lambda$, а для решений с отрицательной энергией (сопоставляемых античастице) уже $\mu = 2\lambda$; в связи с данной задачей см. также 15.27 и 15.29.

15.29. Так как $\hat{P}_{\pm}^2 = \hat{P}_{\pm}$, то эрмитовы операторы $\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5)$ являются проекционными, см. 1.31. Имея в виду установленную в предыдущей задаче связь с.з. оператора γ_5 со спиральностью λ , замечаем, что оператор \hat{P}_+ проектирует на состояния: со спиральностью $\lambda_1 = -1/2$, действуя на решения уравнения Дирака с положительной энергией, и с $\lambda_2 = +1/2$ — в случае отрицательной энергии (т. е. для состояний, сопоставляемых античастице, сравнить с 15.27). Оператор \hat{P}_- проектирует на состояния с противоположными значениями спиральности.

В заключение заметим, что противоположность по знаку значений спиральности частицы и античастицы, сопоставляемых с.з. μ матрицы γ_5 , связана с тем, что уравнение $\gamma_5 \Psi = \mu \Psi$ при зарядовом сопряжении принимает вид $\gamma_5 \Psi_c = -\mu \Psi_c$, так как $\hat{C}\gamma_5 = -\gamma_5\hat{C}$.

15.30. Уравнения Дирака для двухкомпонентных спиноров в случае безмассовой частицы, $m = 0$, имеют вид (сравнить с 15.21, $\sigma = 2\hat{\mathbf{s}} \equiv \hat{\mathbf{s}}/s$)

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = c\sigma\hat{\mathbf{p}}\chi \equiv \frac{c}{s} \hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{p}}\chi, \quad i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\sigma\hat{\mathbf{p}}\varphi \equiv \frac{c}{s} \hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{p}}\varphi. \quad (1)$$

Они содержат два спинора φ и χ , описывающие спиновые свойства частицы с $s = 1/2$ по отношению к чисто пространственному вращению системы координат и независимым образом преобразующиеся при таком преобразовании (но не при преобразовании Лоренца).

Естественное обобщение уравнений (1) на случай частицы с произвольным спином s (и массой $m = 0$) состоит в отождествлении в этих уравнениях φ и χ с двумя спиновыми функциями, отвечающими спину s и имеющими по $(2s + 1)$ компонент

каждая; при этом под \widehat{s} следует понимать оператор спина величины s .

В случае спина $s = 1$ удобно воспользоваться векторным представлением, в котором компоненты спиновой функции являются декартовыми компонентами вектора (см. задачи § 4 главы 3), а операторы компонент спина определяются соотношениями $\widehat{s}_i a_k \equiv -i \varepsilon_{ikl} a_l$. При этом

$$\widehat{s} \widehat{p} a_k = \widehat{s}_i \widehat{p}_i a_k = -\hbar \varepsilon_{ikl} \frac{\partial}{\partial x_i} a_l \equiv \hbar (\text{rot } \mathbf{a})_k,$$

т. е. $(\widehat{s} \widehat{p}) \mathbf{a} = \hbar \text{rot } \mathbf{a}$, и отождествив в уравнениях (1) φ и χ соответственно с векторами \mathcal{E} и $i\mathcal{H}$, приходим к уравнениям

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{E} = \text{rot } \mathcal{H}, \quad -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{H} = \text{rot } \mathcal{E},$$

представляющим часть системы уравнений Максвелла. Два других уравнения, $\text{div } \mathcal{E} = 0$ и $\text{div } \mathcal{H} = 0$, выступают как дополнительные условия, накладываемые на векторы \mathcal{E} и \mathcal{H} . В классической электродинамике они приводят к поперечности электромагнитных волн, а в квантовомеханическом аспекте соответствуют исключению состояний фотона с равной нулю спиральностью. Заметим, что подробное изложение квантовой механики фотона содержится в книге [29].

15.31. Плотность тока и плотность заряда для дираковской частицы описываются выражениями (XV. 7)

$$\mathbf{j} = e \Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi \equiv i e c \bar{\Psi} \boldsymbol{\gamma} \Psi, \quad \rho = e \Psi^* \Psi \equiv e \bar{\Psi} \gamma_4 \Psi \quad (1)$$

(подчеркнем, что они справедливы как для свободной частицы, так и для частицы во внешнем электромагнитном поле).

В нерелятивистском пределе (энергия частицы $\varepsilon \approx mc^2$) в волновой функции (биспиноре) $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ нижний спинор χ , удовлетворяющий уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c \sigma \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi - mc^2 \chi + e A_0 \chi,$$

приближенно равен (так как при этом $i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} \approx mc^2 \chi$)

$$\chi \approx \frac{1}{2mc} \sigma \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi, \quad \text{т. е. } |\chi| \ll |\varphi|.$$

Соответственно в ф. частицы описывается выражением

$$\Psi \approx \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{1}{2mc} \sigma \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi \end{pmatrix}, \quad (2)$$

а комплексно сопряженная в. ф.

$$\begin{aligned} \Psi^* &= \left(\varphi^*, \left(\frac{1}{2mc} \sigma \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi \right)^* \right) = \\ &= \left(\varphi^*, \frac{1}{2mc} \left(-\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi^* \sigma \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Подставив выражения (2) и (3) в формулы (1), находим с точностью до членов порядка $(1/c)^2$

$$\rho = e\Psi^*\Psi \approx e\varphi^*\varphi, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= ec\Psi^* \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \Psi = \\ &= ec \left(\varphi^*, \frac{1}{2mc} \left(-\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi^* \sigma \right) \begin{pmatrix} \sigma \\ \sigma\varphi \end{pmatrix} \left(\frac{\sigma}{2mc} \left(\sigma \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) \varphi \right) = \\ &= \frac{e}{2m} \left\{ \varphi^* \sigma \left(\sigma \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) \varphi - \left(\left(\hat{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi^* \sigma \right) \sigma\varphi \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Воспользовавшись соотношением $\sigma_i \sigma_k = \delta_{ik} + i\epsilon_{ikl} \sigma_l$ для матриц Паули, выражение (5) можно упростить:

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{e}{2m} \left\{ \varphi^* \sigma_i \sigma_k \left(\hat{p}_k - \frac{e}{c} A_k \right) \varphi - \left(\left(\hat{p}_k + \frac{e}{c} A_k \right) \varphi^* \right) \sigma_k \sigma_l \varphi \right\} = \\ &= \frac{e}{2m} \left\{ \varphi^* \hat{p}_i \varphi - (\hat{p}_i \varphi^*) \varphi - \frac{2e}{c} A_i \varphi^* \varphi + \right. \\ &\quad \left. + i\epsilon_{ikl} [\varphi^* \sigma_l \hat{p}_k \varphi + (\hat{p}_k \varphi^*) \sigma_l \varphi] \right\}, \end{aligned}$$

и так как при этом

$$\begin{aligned} \epsilon_{ikl} \left[\varphi^* \sigma_l \frac{\partial}{\partial x_k} \varphi + \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \varphi^* \right) \sigma_l \varphi \right] &= \\ &= \epsilon_{ikl} \frac{\partial}{\partial x_k} \varphi^* \sigma_l \varphi \equiv \{\text{rot}(\varphi^* \sigma \varphi)\}_i, \end{aligned}$$

то получаем

$$\mathbf{j} = -\frac{ie\hbar}{2m} \{ \varphi^* \nabla \varphi - (\nabla \varphi^*) \varphi \} - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \varphi^* \varphi + \frac{e\hbar}{2m} \text{rot}(\varphi^* \sigma \varphi), \quad (6)$$

что совпадает с формулами (VII.4—VII.6) нерелятивистской теории для плотности тока частицы со спином $s = 1/2$, имеющей заряд e и магнитный момент $\mu = e\hbar/2mc$.

15.32. Учитывая явный вид матриц Дирака (XV.5) и тензора электромагнитного поля

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{H}_z & -\mathcal{H}_y & -i\mathcal{E}_x \\ -\mathcal{H}_z & 0 & \mathcal{H}_x & -i\mathcal{E}_y \\ \mathcal{H}_y & -\mathcal{H}_x & 0 & -i\mathcal{E}_z \\ i\mathcal{E}_x & i\mathcal{E}_y & i\mathcal{E}_z & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} F_{4i} &= -F_{i4} = i\mathcal{E}_i, \\ F_{ik} &= \epsilon_{ikl} \mathcal{H}_l, \\ i, k &= 1, 2, 3, \end{aligned}$$

рассматриваемый гамильтониан легко преобразовать к виду

$$\hat{H} = c\sigma\hat{p} - \kappa\beta\Sigma\mathcal{H} + i\kappa\sigma\mathcal{E} + mc^2\beta. \quad (1)$$

При этом волновое уравнение $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}\Psi$ приводит к следующим уравнениям для двухкомпонентных спиноров φ и χ в биспинорной волновой функции $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi &= c\sigma\hat{p}\chi + mc^2\varphi + i\kappa\sigma\mathcal{E}\chi - \kappa\sigma\mathcal{H}\varphi, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi &= c\sigma\hat{p}\varphi - mc^2\chi - i\kappa\sigma\mathcal{E}\varphi + \kappa\sigma\mathcal{H}\chi. \end{aligned} \quad (2)$$

Для перехода к нерелятивистскому пределу, когда энергия частицы $\epsilon \approx mc^2$, следует, как обычно, выделить из волновой функции множитель $e^{-imc^2t/\hbar}$, т. е. записать ее в виде $\Psi = e^{-imc^2t/\hbar} \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$ и учесть неравенство

$$\left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi} \right| \sim |E\tilde{\Psi}| \ll mc^2 |\tilde{\Psi}|, \quad \tilde{\Psi} = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} \quad (3)$$

в выражении

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = e^{-imc^2t/\hbar} \left[mc^2\tilde{\Psi} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi} \right]$$

(E — характерная величина энергии нерелятивистской частицы). При этом второе из уравнений (2) принимает вид

$$2mc^2\tilde{\chi} - \kappa\sigma\mathcal{H}\tilde{\chi} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\chi} = (c\sigma\hat{p} - i\kappa\sigma\mathcal{E}) \tilde{\varphi}. \quad (4)$$

Из приведенных соотношений с учетом предполагаемого неравенства $|\kappa\mathcal{H}| \ll mc^2$ следует

$$\tilde{\chi} \approx \frac{1}{2mc} \left(\sigma\hat{p} - \frac{i\kappa}{c} \sigma\mathcal{E} \right) \tilde{\varphi} \quad (5)$$

(заметим, что $|\tilde{\chi}| \ll |\tilde{\varphi}|$, как и в случае свободной нерелятивистской частицы).

Далее, подставляя (5) в первое из уравнений (2) (предварительно выделив из спиноров φ и χ множитель $e^{-imc^2t/\hbar}$), получаем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi} = \frac{1}{2m} \left(\sigma\hat{p} + \frac{i\kappa}{c} \sigma\mathcal{E} \right) \left(\sigma\hat{p} - \frac{i\kappa}{c} \sigma\mathcal{E} \right) \tilde{\varphi} - \kappa\sigma\mathcal{H}\tilde{\varphi}. \quad (6)$$

Записав здесь $\hat{\sigma}_p = \sigma_i \beta_i$, $\sigma \mathcal{E} = \sigma_k \mathcal{E}_k$ и воспользовавшись соотношением $\sigma_i \sigma_k = \delta_{ik} + i \epsilon_{ikl} \sigma_l$ для матриц Паули, находим

$$(\hat{\sigma}_p)(\sigma \mathcal{E}) - (\sigma \mathcal{E})(\hat{\sigma}_p) = (\hat{p} \mathcal{E}) - (\mathcal{E} \hat{p}) + i [\hat{p} \mathcal{E}] \sigma - i [\mathcal{E} \hat{p}] \sigma,$$

причем

$$(\hat{p} \mathcal{E}) - (\mathcal{E} \hat{p}) = -i \hbar \operatorname{div} \mathcal{E},$$

$$[\hat{p} \mathcal{E}] - [\mathcal{E} \hat{p}] = -i \hbar \operatorname{rot} \mathcal{E} - 2 [\mathcal{E} \hat{p}] \approx -2 [\mathcal{E} \hat{p}]$$

(так как $\operatorname{rot} \mathcal{E} = -\partial \mathcal{H} / c \partial t$, то слагаемое с $\operatorname{rot} \mathcal{E}$ можно опустить как более высокого порядка малости по $1/c$; в стационарном случае оно обращается в нуль тождественно). Учитывая эти соотношения, равенство $(\hat{\sigma}_p)^2 = \hat{p}^2$ и пренебрегая слагаемым $\propto (\mathcal{E}/c)^2$, приводим уравнение (6) к виду

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \tilde{\varphi} - \kappa \sigma \mathcal{H} \tilde{\varphi} + \frac{\kappa}{mc} \left(-\frac{\hbar}{2} \operatorname{div} \mathcal{E} - [\mathcal{E} \hat{p}] \sigma \right) \tilde{\varphi}. \quad (7)$$

В пренебрежении «малым» спинором $\tilde{\chi}$ в волновой функции $\tilde{\Psi}$, это уравнение является уравнением Шрёдингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \kappa \sigma \mathcal{H} + \frac{\kappa}{mc} \left(-\frac{\hbar}{2} \operatorname{div} \mathcal{E} - [\mathcal{E} \hat{p}] \sigma \right), \quad (8)$$

сравнить с гамильтонианом Паули (VII. 1). Отсутствие в \hat{H} слагаемого eA_0 означает, что описываемая им частица является нейтральной (A_0 — скалярный потенциал внешнего электростатического поля), а наличие слагаемого $-\kappa \sigma \mathcal{H}$ указывает на то, что частица имеет магнитный момент, равный $\mu \equiv \kappa$.

Последний, третий член в выражении (8) описывает спин-орбитальное взаимодействие. При этом слагаемое $-\frac{\kappa}{mc} [\mathcal{E} \hat{p}] \sigma$ в этом взаимодействии является естественным квантовомеханическим обобщением энергии взаимодействия движущегося классического магнитного диполя с электростатическим полем, обсуждавшимся в 13.60.

Гамильтониан (1) и его нерелятивистский предел (8) используют для описания нейтрона в электромагнитном поле. Выражение $\frac{i}{2} \mu' \beta \gamma_\tau \gamma_\nu F_{\tau\nu}$ применяют также для описания взаимодействия с электромагнитным полем *аномального* магнитного момента μ' заряженных частиц со спином $s = 1/2$. При этом взаимодействие *нормальной* части магнитного момента, равной $e\hbar/2mc$, как и заряда e частицы с полем, описывается выражением $-e\mathbf{a}\mathbf{A} + eA_0$. Соответственно релятивистское волновое

уравнение для такой частицы в электромагнитном поле имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left\{ c\alpha \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + mc^2\beta + eA_0 + \frac{i}{2} \mu' \beta \gamma_\tau \gamma_\nu F_{\tau\nu} \right\} \Psi$$

(напомним, что для частицы со спином $s = 1/2$, имеющей заряд e и магнитный момент μ , «разбиение» последнего на нормальную и аномальную части определяется соотношениями

$$\mu = \mu_{\text{норм}} + \mu_{\text{аном}}; \quad \mu_{\text{норм}} = \frac{e\hbar}{2mc}, \quad \mu_{\text{аном}} = \mu - \frac{e\hbar}{2mc}.$$

15.33. Энергетический спектр и соответствующие биспинорные волновые функции стационарных состояний частицы определяются из решения уравнения Дирака в магнитном поле (e — заряд частицы)

$$\left(c\alpha \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + mc^2\beta \right) u = \epsilon u,$$

$$\Psi_\epsilon(\mathbf{r}, t) = ue^{-\frac{i\epsilon t}{\hbar}} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} e^{-\frac{i\epsilon t}{\hbar}},$$

или для двухкомпонентных спиноров

$$(\epsilon - mc^2) \varphi = c\sigma \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi, \quad (\epsilon + mc^2) \chi = c\sigma \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi. \quad (1)$$

Исключая спинор χ из этой системы, получаем

$$(\epsilon^2 - m^2c^4) \varphi = c_2 \left(\sigma \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 \varphi. \quad (2)$$

Это уравнение, воспользовавшись соотношением

$$\left(\sigma \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 = \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{c} \sigma \mathcal{H}, \quad \mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}$$

(см., например, 7.10), можно записать в виде

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \sigma \mathcal{H} \right\} \varphi = \frac{\epsilon^2 - m^2c^4}{2mc^2} \varphi, \quad (3)$$

отличающемся лишь заменой E на $(\epsilon^2 - m^2c^4)/2mc^2$ от уравнения Паули для частицы со спином $s = 1/2$, имеющей заряд e и магнитный момент $\mu = e\hbar/2mc$. Уравнение (3) для случая однородного магнитного поля \mathcal{H}_0 было решено в 7.9. При выборе векторного потенциала $\mathbf{A} = (0, \mathcal{H}_0 x, 0)$ решение уравнения (3)

имеет вид

$$\varepsilon_{np_z\sigma_z}^2 - m^2c^4 = 2mc^2 \left[\hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e\hbar\mathcal{H}_0}{2mc} \sigma_z + \frac{p_z^2}{2m} \right],$$

$$n = 0, 1, \dots,$$

$$\Psi_{np_y p_z \sigma_z} = C e^{\frac{i}{\hbar} (p_y y + p_z z)} \exp \left[-\frac{1}{2a^2} \left(x - \frac{cp_y}{e\mathcal{H}_0} \right)^2 \right] \times \\ \times H_n \left(\frac{1}{a} \left(x - \frac{cp_y}{e\mathcal{H}_0} \right) \right) \Phi_{\sigma_z}, \quad (4)$$

$$\omega_0 = \frac{|e|\mathcal{H}_0}{mc}, \quad a = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|\mathcal{H}_0}},$$

где постоянный спинор Φ_{σ_z} является собственной функцией оператора σ_z , отвечающей с.з. $\sigma_z = \pm 1$ (подчеркнем, что ось z направлена вдоль магнитного поля).

Второе из уравнений (1) определяет спинор $\chi_{np_y p_z \sigma_z}$, а тем самым и в. ф. $\Psi_{np_y p_z \sigma_z}$ рассматриваемых состояний.

Заметим, что в нерелятивистской теории квантовое число $s_z = \sigma_z/2$ определяет проекцию спина частицы на ось z . В релятивистском случае σ_z утрачивает этот смысл, так как спинор $\chi_{np_y p_z \sigma_z}$ уже не является с.ф. оператора σ_z , а соответственно и в.ф. $\Psi_{np_y p_z \sigma_z}$ не является собственной функцией оператора $\hat{s}_z = \frac{1}{2} \Sigma_z$. Тем не менее, имеющее место в нерелятивистской теории для дираковской частицы вырождение уровней поперечного движения по значениям σ_z , см. 7.9, согласно (4) сохраняется и в релятивистском случае.

Выражение (4) дает два значения энергии, различающиеся знаком. Одно из них, $\varepsilon \geq mc^2$, непосредственно представляет энергетический спектр частицы; другое, $\varepsilon \leq -mc^2$, соответствует античастице, имеющей уже положительную энергию (сравнить со случаем свободной частицы, рассмотренным в 15.27). При этом энергетические спектры в магнитном поле частицы и античастицы одинаковы — очевидный физический результат (сравнить со случаем бесспиновой частицы в магнитном поле, рассмотренным в 15.11).

15.34. Гамильтониан дираковской частицы во внешнем электростатическом поле

$$\hat{H} = c\hat{\alpha}p + mc^2\hat{\beta} + e_1 A_0(r) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{V} = e_1 A_0 = Ze e_1/r.$$

Рассчитаем дифференциальное сечение рассеяния частицы согласно формуле теории возмущений для переходов в непрерыв-

ном спектре между состояниями свободной частицы с определенными значениями импульса ⁷⁾, сравнить с [1, § 126].

При нормировке волновой функции начального состояния частицы с определенным импульсом p_1 на единичную плотность потока (см. 15.22):

$$\Psi_i = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2\varepsilon}} \left(\frac{\varphi_i}{\frac{c\sigma p_1}{\varepsilon + mc^2} \varphi_i} \right) \sqrt{\frac{1}{v}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 r - \varepsilon t)}, \quad (1)$$

$$j = c\Psi_i^* \alpha \Psi_i = \frac{v_1}{v}, \quad j = 1$$

(ε , v — энергия и скорость частицы), а волновой функции конечного состояния с импульсом p_2 — на единичную плотность вероятности:

$$\Psi_f = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2\varepsilon}} \left(\frac{\varphi_f}{\frac{c\sigma p_2}{\varepsilon + mc^2} \varphi_f} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(p_2 r - \varepsilon t)}, \quad \rho = \Psi_f^* \Psi_f = 1 \quad (2)$$

(спиноры $\varphi_{i, f}$ нормированы на единицу: $|\varphi_{i, f}|^2 = 1$, энергия частицы в начальном и конечном состояниях одинакова) — известная формула теории возмущений для дифференциальной вероятности перехода в единицу времени определяет дифференциальное сечение рассеяния

$$d\sigma = d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{if}|^2 dp_f. \quad (3)$$

Плотность конечных состояний равна

$$\begin{aligned} dp_f &= \int \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i) \frac{d^3 p_f}{(2\pi\hbar)^3} \equiv \\ &\equiv \int \delta(\varepsilon - \varepsilon_2) \frac{p_2 \varepsilon_2 d\varepsilon_2 d\Omega}{(2\pi\hbar)^3 c^2} = \frac{p\varepsilon d\Omega}{(2\pi\hbar)^3 c^2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Матричный элемент возмущения имеет вид

$$\begin{aligned} V_{if} &= \int \Psi_f^* \hat{V} \Psi_i d^3 r = \\ &= \frac{Zee_1 (\varepsilon + mc^2)}{2\varepsilon \sqrt{v}} \int \frac{e^{-iqr}}{r} d^3 r \varphi_f^* \left[1 + \frac{c^2 (\sigma p_2) (\sigma p_1)}{(\varepsilon + mc^2)^2} \right] \varphi_i. \end{aligned} \quad (5)$$

⁷⁾ Более последовательный способ расчета дифференциального сечения, основанный на вычислении амплитуды рассеяния в борновском приближении, см. в 15.37.

где, как обычно, $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1$. Воспользовавшись соотношениями (θ — угол рассеяния)

$$\begin{aligned} (\sigma\mathbf{p}_2)(\sigma\mathbf{p}_1) &= p_2 i p_{1k} \sigma_l \sigma_k = p_2 i p_{1k} (\delta_{ik} + i \varepsilon_{ikl} \sigma_l) = \\ &= \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 + i [\mathbf{p}_2 \mathbf{p}_1] \boldsymbol{\sigma} = p^2 \cos \theta - i p^2 \sin \theta \boldsymbol{\sigma} \mathbf{v}, \\ \mathbf{v} &= [\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2] / |[\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2]|, \quad v^2 = 1, \\ \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{d^3r}{r} &= \frac{4\pi}{q^2} = \frac{\pi \hbar^2}{p^2 \sin^2(\theta/2)}, \end{aligned}$$

преобразуем выражение (5) к более удобному виду:

$$\begin{aligned} V_{if} &= \frac{\pi Z e e_1 \hbar^2}{2\varepsilon p^2 \sqrt{v} (\varepsilon + mc^2) \sin^2(\theta/2)} \times \\ &\times \varphi_f^* \{(\varepsilon + mc^2)^2 + p^2 c^2 \cos \theta - i p^2 c^2 \sin \theta \boldsymbol{\sigma} \mathbf{v}\} \varphi_i. \end{aligned} \quad (6)$$

Формулы (3), (4), (6) определяют дифференциальное сечение рассеяния. Оно зависит от энергии частицы, угла рассеяния, а также от спиновых состояний частицы до и после рассеяния, описываемых спинорами φ_i, φ_f . Не интересуясь поляризационными явлениями при рассеянии, выполним в дифференциальном сечении усреднение по спиновому состоянию частицы в падающем пучке, предполагая его неполяризованным, и суммирование по независимым спиновым состояниям рассеянной частицы (ниже эта операция обозначена чертой над матричным элементом). Воспользовавшись известным из нерелятивистской теории соотношением

$$\overline{|\varphi_f^* (f_1 + i f_2 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{v}) \varphi_i|^2} = |f_1|^2 + |f_2|^2,$$

в рассматриваемом случае получаем

$$\begin{aligned} \overline{|\varphi_f^* \{(\varepsilon + mc^2)^2 + p^2 c^2 \cos \theta - i p^2 c^2 \sin \theta \boldsymbol{\sigma} \mathbf{v}\} \varphi_i|^2} &= \\ &= 4\varepsilon^2 (\varepsilon + mc^2)^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) \end{aligned}$$

и приходим к окончательному выражению для дифференциального сечения рассеяния неполяризованных частиц:

$$d\bar{\sigma} = \frac{(Z e e_1)^2}{4 p^2 v^2 \sin^4(\theta/2)} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) d\Omega \quad (7)$$

(сравнить с рассеянием бесспиновых частиц, рассмотренным в 15.17). В нерелятивистском пределе $v/c \ll 1$, $p \approx mv$ оно переходит в формулу Резерфорда.

В заключение укажем, что условием применимости полученного результата является выполнение неравенства $|Z e e_1| \ll \hbar v$.

15.35. Выражение для дифференциального сечения рассеяния неполяризованных частиц

$$d\bar{\sigma} = \frac{e^2 p^2 \tilde{A}_0^2(q)}{4\pi^2 \hbar^4 v^2} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) d\Omega \quad (1)$$

можно получить непосредственно из формулы (7) предыдущей задачи, если в ней произвести очевидную замену

$$\frac{\pi Z e e_1 \hbar^2}{p^2 \sin^2(\theta/2)} = \int \frac{Z e e_1}{r} e^{-iqr} dV \rightarrow e \int A_0(r) e^{-iqr} dV \equiv e \tilde{A}_0(q)$$

Воспользовавшись соотношением $d\Omega = \frac{\pi \hbar^2}{p^2} dq^2$, находим полное сечение рассеяния

$$\bar{\sigma}(e) = \frac{e^2}{4\pi \hbar^2 v^2} \int_0^{4p^2/\hbar^2} \tilde{A}_0^2(q) \left(1 - \frac{\hbar^2 v^2}{4p^2 c^2} q^2\right) dq^2. \quad (2)$$

В ультрарелятивистском пределе имеем $p \approx \varepsilon/c$, $v \approx c$. Учитывая, что в интеграле (2) существенна область конечных значений $q^2 \leq R^{-2}$, где R — радиус потенциала $A_0(r)$, замечаем, что при $\varepsilon \rightarrow \infty$ сечение рассеяния стремится к постоянному значению

$$\bar{\sigma}(e) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow \infty} \sigma_0 = \frac{e^2}{4\pi \hbar^2 c^2} \int_0^{\infty} \tilde{A}_0^2(q) dq^2 \quad (3)$$

(совпадающему с сечением рассеяния заряженной бесспиновой частицы, см. 15.18). Отметим, что сходимость интеграла в выражении (3) на нижнем пределе ($q^2 \rightarrow 0$) предполагает следующее убывание потенциала на больших расстояниях: $|A_0(r)| < < B/r^2$ (как и в нерелятивистском случае, иначе полное сечение рассеяния обращается в бесконечность).

15.36. Искомые функции Грина легко могут быть выражены через соответствующие функции Грина свободной нерелятивистской частицы $g^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, для которых

$$(-\Delta - k^2) g^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad g^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Воспользовавшись соотношением

$$-\hbar^2 c^2 \Delta - \varepsilon^2 + m^2 c^4 \equiv (c\hat{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\hat{\beta} - \varepsilon)(c\hat{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\hat{\beta} + \varepsilon),$$

имеем ($e^2 = \hbar^2 k^2 c^2 + m^2 c^4$)

$$\begin{aligned} & (-\hbar^2 c^2 \Delta - \hbar^2 c^2 k^2) \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi\hbar^2 c^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \equiv \\ & \equiv (c\hat{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\beta - e)(c\hat{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\beta + e) \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi\hbar^2 c^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \\ & \qquad \qquad \qquad = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}$$

Отсюда непосредственно следует вид функций Грина свободной дираковской частицы

$$\hat{G}_e^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\hbar^2 c^2} (c\hat{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\beta + e) \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (1)$$

или, с явным указанием биспинорных индексов,

$$\hat{G}_{\epsilon\alpha\beta}^\pm = \frac{1}{4\pi\hbar^2 c^2} (-i\hbar c\alpha\nabla + mc^2\beta + e)_{\alpha\beta} \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Аналогично, воспользовавшись соотношением

$$-\hbar^2 c^2 \Delta - e^2 + m^2 c^4 \equiv (ic\beta + mc^2)(-ic\beta + mc^2),$$

находим функции Грина

$$\begin{aligned} f_e^\pm &= \frac{-ic\beta + mc^2}{4\pi\hbar^2 c^2} \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \\ &= \frac{-\hbar c\gamma\nabla + e\gamma_4 + mc^2}{4\pi\hbar^2 c^2} \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \end{aligned}$$

удовлетворяющие уравнению

$$(ic\beta + mc^2) f_e^\pm = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

15.37. Записав с помощью Грина G_e^+ из 15.36 уравнение Дирака в интегральной форме, получаем амплитуду рассеяния в борновском приближении в виде (сравнить с XIII.3—6), e — заряд частицы, $F = f u_1$):

$$\hat{f}_B = e(\alpha\mathbf{p}_2 + mc^2\beta + e)(\alpha\tilde{A}(\mathbf{q}) - \tilde{A}_0(\mathbf{q})) / 4\pi\hbar^2 c^2.$$

Здесь биспинорная амплитуда F рассеянной волны связана с асимптотикой решения при $r \rightarrow \infty$

$$\Psi_{\mathbf{k}_1}^+(\mathbf{r}) = u_1 e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} + F e^{ikr}/r, \quad \mathbf{p}_2 = \hbar \mathbf{k} n.$$

Отметим соотношение (при нормировке $\bar{u}_{1(2)} u_{1(2)} = 1$)

$$d\sigma/d\Omega_i = |u_2^*(\mathbf{p}_2) \hat{F}_B u_1(\mathbf{p}_1)|^2 = |u_2^* \hat{G}_B u_1|^2,$$

$$\text{где } \hat{G}_B = e e (\alpha\tilde{A}(\mathbf{q}) - \tilde{A}_0(\mathbf{q})) / 2\pi\hbar^2 c^2.$$

ДОПОЛНЕНИЕ

Д1. Интегралы и интегральные соотношения.

$$1. \quad \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk, \quad \delta(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{ikr} d^3k. \quad (Д1.1)$$

Аналогичное соотношение справедливо и для n -мерного пространства.

$$2. \quad \int_a^b \frac{F(x) dx}{x - x_0 \mp i\varepsilon} = \int_a^b \frac{F(x) dx}{x - x_0} \pm i\pi F(x_0). \quad (Д1.2)$$

Здесь $a < x_0 < b$; $\varepsilon > 0$ — бесконечно мало; \int — интеграл в смысле главного значения; о вычислении мнимой части интеграла см. 13.11.

$$3. \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx} dk}{k^2 - \kappa^2 \mp i\varepsilon} = \pm i \frac{\pi}{\kappa} e^{\pm i\kappa|x|},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx} dk}{k^2 + \kappa^2} = \frac{\pi}{\kappa} e^{-\kappa|x|}, \quad (Д1.3)$$

x и κ — вещественные, причем $\kappa > 0$; $\varepsilon > 0$ бесконечно мало. Интегралы вычисляются с помощью вычетов замыканием контура интегрирования в верхнюю (при $x > 0$) или нижнюю (при $x < 0$) полуплоскость комплексной переменной k .

$$4. \quad \int \frac{1}{r} e^{ikr - \kappa r} d^3r = \frac{4\pi}{k^2 + \kappa^2}, \quad \text{Re } \kappa > 0. \quad (Д1.4)$$

Интеграл (определяющий при $\kappa = 0$ фурье-компоненту кулоновского потенциала) вычисляется в сферических координатах с выбором полярной оси вдоль вектора k .

$$5. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(x^2 + a^2)^{n+1}} = \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial a^{2n}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + a^2} = \\ = \frac{\pi (2n-1)!!}{2^n n! a^{2n+1}}, \quad a > 0. \quad (D1.5)$$

$$6. \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-a^2 x^2} dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial a^{2n}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2 x^2} dx = \\ = \frac{\sqrt{\pi} (2n-1)!!}{2^n a^{2n+1}}, \quad a > 0. \quad (D1.6)$$

$$7. \int_a^b \frac{1}{x} \sqrt{(x-a)(b-x)} dx = \frac{\pi}{2} (a+b-2\sqrt{ab}), \quad 0 < a < b. \quad (D1.7)$$

$$8. \int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2}. \quad (D1.8)$$

Д2. Цилиндрические функции

Цилиндрическими функциями $Z_\nu(z)$ называют решения дифференциального уравнения

$$Z''_\nu(z) + \frac{1}{z} Z'_\nu(z) + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) Z_\nu(z) = 0. \quad (D2.1)$$

Функции Бесселя

$$J_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(k+\nu+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k} \quad (D2.2)$$

являются частным видом цилиндрических функций. Если индекс ν не совпадает с целым числом, то функции Бесселя $J_{\pm\nu}(z)$ представляют два линейно независимых решения уравнения (D2.1), так что

$$Z_\nu(z) = C_1 J_\nu(z) + C_2 J_{-\nu}(z), \quad \nu \neq 0, 1, 2, \dots$$

Поведение функций Бесселя при $z \rightarrow 0$ непосредственно следует из их определения (D2.2), а асимптотика при $z \rightarrow \infty$ имеет вид

$$J_\nu(z) \approx \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} \cos\left(z - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (D2.3)$$

Функции Неймана

$$N_\nu(z) \equiv Y_\nu(z) = \frac{1}{\sin \pi\nu} [\cos(\pi\nu) J_\nu(z) - J_{-\nu}(z)]. \quad (D2.4)$$

Для целочисленных значений индекса $\nu = n$ они, $N_n(z) = \lim_{\nu \rightarrow n} N_\nu(z)$ при $\nu \rightarrow n$, являются вторым, линейно независимым

с $J_\nu(z)$ решением уравнения (Д2.1); при этом

$$N_0(z) \approx \frac{2}{\pi} \ln \frac{\gamma z}{2} \quad \text{и} \quad N_\nu(z) \approx -\frac{\Gamma(\nu)}{\pi} \left(\frac{2}{z}\right)^\nu \quad \text{для} \quad \nu > 0, \quad (\text{Д2.5})$$

здесь $\gamma = e^C = 1,781\dots$ — постоянная Эйлера, $C = 0,5772\dots$. Асимптотика функций Неймана при $z \rightarrow \infty$ имеет вид:

$$N_\nu(z) \approx \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} \sin\left(z - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (\text{Д2.6})$$

С функциями Бесселя и Неймана тесно связаны функции Ганкеля

$$H_\nu^{(1)}(z) = J_\nu(z) + iN_\nu(z), \quad H_\nu^{(2)}(z) = J_\nu(z) - iN_\nu(z), \quad (\text{Д2.7})$$

а также модифицированные функции Бесселя $I_\nu(z)$ и $K_\nu(z)$ (функции Макдональда), определяемые соотношениями

$$I_\nu(z) = i^{-\nu} J_\nu(iz) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k! \Gamma(\nu + k + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k}, \quad (\text{Д2.8})$$

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2 \sin \pi\nu} [I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)], \quad \nu \neq 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Для целочисленных значений индекса $K_n(z) = \lim_{\nu \rightarrow n} K_\nu(z)$ при $\nu \rightarrow n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; при этом

$$K_0(z) \approx \ln \frac{2}{\gamma z}; \quad K_n(z) \approx \frac{(n-1)!}{2} \left(\frac{2}{z}\right)^n, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (\text{Д2.9})$$

сравнить с (Д2.5). Суперпозиция модифицированных функций Бесселя

$$u_\nu(z) \equiv Z_\nu(iz) = C_1 I_\nu(z) + C_2 K_\nu(z)$$

(представляющая цилиндрическую функцию мнимого аргумента) является общим интегралом уравнения

$$u''_\nu + \frac{1}{z} u'_\nu - \left(1 + \frac{\nu^2}{z^2}\right) u_\nu = 0. \quad (\text{Д2.10})$$

В заключение отметим, что с цилиндрическими функциями связаны решения дифференциальных уравнений

$$u'' + az^\nu u = 0, \quad u = \sqrt{z} Z_{\frac{1}{\nu+2}} \left(\frac{2\sqrt{a}}{\nu+2} z^{1+\nu/2}\right), \quad (\text{Д2.11})$$

$$u'' + \left[az^\nu - \frac{l(l+1)}{z^2}\right] u = 0,$$

$$u = \sqrt{z} Z_{\frac{2l+1}{\nu+2}} \left(\frac{2\sqrt{a}}{\nu+2} z^{1+\nu/2}\right), \quad (\text{Д2.12})$$

$$u''(z) + (\gamma^2 e^{2z} - \nu^2) u(z) = 0, \quad u = Z_\nu(\gamma e^z), \quad (\text{Д2.13})$$

имеющие важные квантовомеханические приложения.

Д3. $1/N$ -разложение в квантовой механике

Метод $1/N$ -разложения является расчетным методом, развитым в последнее время и используемым в различных разделах теоретической физики. Идея метода состоит в «конструировании» параметра N для рассматриваемой системы, при значениях $N \gg 1$ которого решение задачи упрощается и возможно получение его в виде разложения по $1/N$. При удачном выборе параметра N область применимости такого разложения может «затягиваться» вплоть до значений $N \sim 1$, характеризующих исходную систему (сравнить с высокой точностью квазиклассического результата для E_n и при $n \sim 1$, хотя формальное условие применимости его $n \gg 1$). Выбор параметра N связывается с расширением числа степеней свободы (числа состояний, размерности пространства и т. п.) рассматриваемой системы. Ниже рассмотрено несколько элементарных реализаций такого подхода¹⁾ при решении одночастичного уравнения Шрёдингера.

1. Рассмотрим состояния дискретного спектра частицы в одномерном потенциале $U(x) = -U_0 f(x/a)$, представляющем яму с одним минимумом (в точке $x_0 = 0$). По мере увеличения параметра

$$N = (ma^2 U_0 / \hbar^2)^{1/2} \quad (\text{Д3.1})$$

число связанных состояний частицы возрастает. В случае $N \gg 1$ волновые функции нижних уровней локализованы вблизи точки минимума потенциала, в которой $U'(0) = 0$. При этом для потенциала можно воспользоваться разложением по степеням x/a (ниже $\hbar = m = a = 1$):

$$U(x) = U(0) + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4 + \dots,$$

где

$$\omega^2 = U''(0), \quad \alpha = U'''(0)/6, \quad \beta = U^{IV}(0)/24. \quad (\text{Д3.2})$$

Здесь третий и последующие члены разложения выступают как возмущение; невозмущенная система — осциллятор с частотой ω . Ряд теории возмущений по степеням ангармонических поправок

$$E_n = U(0) + \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{15}{4} \frac{\alpha^2}{\omega^4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) + \frac{3}{2} \frac{\beta}{\omega^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) + \dots, \quad (\text{Д3.3})$$

см. [1, § 38], применительно к рассматриваемой задаче представляет $1/N$ -разложение для энергетических уровней частицы (при этом $U(0) \sim N^2$, $\omega \sim N$, $(\alpha^2/\omega^4) \sim (\beta/\omega^2) \sim N^0 = 1$ и т. д.). Этот результат асимптотически точен при $N \rightarrow \infty$. Однако, как правило, для гладких потенциалов он имеет достаточно высокую точность и при значениях $N \gtrsim 1$ (для увеличения точности следует учесть более «высокие» ангармонические поправки,

¹⁾ О развитии метода $1/N$ -разложения и его приложениях см. обзоры: *Mlodinow L. D., Paranicolaou N.* // Ann. Phys. 1980. V. 128. P. 314; 1981. V. 131. P. 1, статью *Мур В. Д., Попов В. С., Сергеев А. В.* // ЖЭТФ. 1990. Т. 97. С. 32 и цитированную в них литературу.

их вычисление выполняется элементарно). Проиллюстрируем это обстоятельство на конкретных потенциалах.

а) Для потенциала

$$U(x) = -U_0 \operatorname{ch}^{-2}(x/a) \quad (\text{Д3.4})$$

выражение (Д3.3) принимает вид (в выбранных единицах $N = \sqrt{U_0}$ и $\omega = \sqrt{2U_0}$):

$$E_n(1/N) = -N^2 + \sqrt{2} \left(n + \frac{1}{2}\right) N - \frac{1}{2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) + O(N^{-1}) \approx \\ \approx -U_0 + \sqrt{2U_0} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right). \quad (\text{Д3.5})$$

Сравним его с точным спектром [1, § 23]

$$E_n = -\frac{1}{8} \left[\sqrt{1 + 8U_0} - (2n + 1) \right]^2 \quad (\text{Д3.6})$$

и с квазиклассическим выражением $E_n^{\text{КВ}}$, отличающимся от (Д3.6) лишь заменой $1 + 8U_0$ на $8U_0$. Для основного уровня при различных значениях N имеем

$N = \sqrt{U_0}$	1	1,5	2	3	4
$-E_0(1/N)$	0,543	1,439	2,836	7,129	13,422
$-E_0$	0,500	1,410	2,814	7,114	13,411
$-E_0^{\text{КВ}}$	0,418	1,314	2,711	7,004	13,297

Для первого возбужденного уровня, $n = 1$, получаем

$N = \sqrt{U_0}$	1,5	2	3	4
$-E_1(1/N)$	0,318	1,007	3,886	8,765
$-E_1$	0,231	0,942	3,842	8,732
$-E_1^{\text{КВ}}$	0,193	0,882	3,761	8,640

Заметим, что этот уровень появляется при значении $U_0 = 1$ (согласно (Д3.6) общее число дискретных уровней в рассматриваемом потенциале при $N \gg 1$ составляет $N_{\text{ур}} \approx \sqrt{2}N$).

Обсудим на примере потенциала (Д3.4) вопрос о волновых функциях частицы в приближении $1/N$ -разложения. По формулам теории возмущений (VIII. 2) получаем

$$\Psi_0(x) \approx [\Psi_0^{(0)}(x) + c_{02}^{(1)}\Psi_2^{(0)}(x) + c_{04}^{(1)}\Psi_4^{(0)}(x)], \quad (\text{Д3.7})$$

где $\Psi_n^{(0)}(x)$ — собственные функции линейного осциллятора с частотой $\omega = \sqrt{2U_0}$. При этом возмущение осциллятора имеет вид

$V = -\frac{2}{3} U_0 x^4$, так что отличные от нуля коэффициенты разложения $c_{0k}^{(1)} = \langle k | V | 0 \rangle$ равны

$$c_{02}^{(1)} = 1/4 \sqrt{U_0}, \quad c_{04}^{(1)} = 1/8 \sqrt{3U_0}.$$

Подчеркнем, что волновая функция²⁾ (Д3.7) нормирована на единицу с точностью до членов второго порядка по $1/N$.

Точная волновая функция основного состояния имеет вид

$$\tilde{\Psi}_0(x) = A \operatorname{ch}^{-2s} x, \quad s = \frac{1}{2} (\sqrt{8U_0 + 1} - 1),$$

см. [1, § 23]. Нормировочный коэффициент легко найти для значений $U_0 = 1$ (при этом $s = 1$) и $U_0 = 3$ ($s = 2$): $A(1) = 1/\sqrt{2}$ и $A(3) = \sqrt{3}/2$.

Сравним значения волновых функций в нуле. При этом $\tilde{\Psi}_0(0) = A$, а

$$\Psi_0(0) = \Psi_0^{(0)}(0) (1 - 3/8 \sqrt{8U_0}) = (\sqrt{2U_0}/\pi)^{1/4} (1 - 3/8 \sqrt{8U_0})$$

и для отношения $R = \Psi_0(0)/\tilde{\Psi}_0(0)$ получаем:

$$R = 1,0048 \text{ при } U_0 = 1 \text{ и } R \approx 1,0020 \text{ при } U_0 = 3.$$

Как видно, $1/N$ -разложение обеспечивает высокую точность как при расчете энергетических уровней, так и волновых функций в существенной области их локализации даже в случае сравнительно небольших значений N , когда в потенциале существует всего несколько дискретных уровней. Следует ожидать, что это обстоятельство будет проявляться и в общем случае для достаточно «гладких» потенциалов. Рассмотрим еще несколько примеров.

б) Для потенциала $U(x) = U_0(a/x - x/a)^2$ в рассматриваемом приближении получаем ($N = \sqrt{U_0}$, положено $a = 1$)

$$E_n(1/N) = \sqrt{8U_0} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{8} + \dots \quad (\text{Д3.8})$$

Сравнение с точным выражением для спектра

$$\tilde{E}_n = \sqrt{8U_0} \left[n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} (\sqrt{8U_0 + 1} - \sqrt{8U_0}) \right] \quad (\text{Д3.9})$$

показывает и в этом случае высокую точность результата $1/N$ -разложения при значениях $N \geq 1$; так, при $N = 1$ для основного уровня $E_0/E_0 = 1,026$.

в) Для потенциала ($U_0 > 0, a > 0, b > 0$)

$$U(x) = U_0 (e^{-2x/a} - b e^{-x/a})$$

²⁾ Приведенное выражение для волновой функции справедливо лишь в области существенной локализации частицы (и неприменимо на больших расстояниях в классически запрещенной области; в этой области для в. ф. можно воспользоваться квазиклассическим выражением).

рассматриваемое $1/N$ -разложение дает ($N = \sqrt{U_0}$, $a = 1$):

$$E_n(1/N) = -\frac{1}{4} U_0 b^2 + \sqrt{\frac{1}{2} U_0 b^2} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + \dots \quad (\text{Д3.10})$$

Приведенные три члена разложения совпадают с точным результатом для спектра $E_n = -\frac{1}{8} [\sqrt{2U_0 b^2} - (2n + 1)]^2$, сравнить с [1, § 23].

2. Рассмотрим теперь энергетический спектр связанных s -состояний частицы в центральном потенциале $U(r)$. Вычисление его с помощью $1/N$ -разложения можно выполнить, если исходить из решения уравнения Шрёдингера для N -мерного пространства.

В N -мерном пространстве для сферически симметричных функций имеем³⁾

$$\Delta f(r) = f'' + \frac{N-1}{r} f', \quad r^2 = \sum_{i=1}^N x_i^2.$$

Поэтому уравнение Шрёдингера для s -состояний подстановкой $\Psi = \chi(r)/r^\nu$ с $\nu = (N-1)/2$ сводится к обычному одномерному уравнению Шрёдингера (ниже $\hbar = m = 1$):

$$-\frac{1}{2} \chi'' + (U_{\text{эф}}(r) - E) \chi = 0, \quad U_{\text{эф}} = \frac{(N-1)(N-3)}{8r^2} + U(r). \quad (\text{Д3.11})$$

При больших значениях N благодаря квазицентробежному барьеру $\propto N^2/r^2$ волновые функции и энергетический спектр состояний вблизи минимума эффективного потенциала обладают свойствами, подобными отмеченным в пункте 1 для потенциала $U = U_0 f(x/a)$ при $U_0 \rightarrow \infty$ и могут быть рассчитаны указанным там способом.

Для решения уравнения (Д3.11) при $N \gg 1$ с помощью разложения по параметру $1/N$ удобно сначала получить решение в виде разложения по параметру $1/\tilde{N}$, где $\tilde{N}^2 = (N-1)(N-3)$ и уже в нем выполнить разложение по $1/N$. Рассмотрим приложения изложенного метода к конкретным потенциалам.

а) Для потенциала $U = Fr$ уравнение (Д3.11) принимает вид

$$-\frac{1}{2} \chi'' + [\tilde{N}^2/8r^2 + Fr] \chi = E\chi.$$

Выполнив разложение $U_{\text{эф}}$ в окрестности точки $r_0 = (\tilde{N}^2/4F)^{1/3}$ минимума эффективного потенциала:

$$U_{\text{эф}} = \frac{3}{2} Fg^{-1/3} + \frac{3}{2} Fg^{1/3} x^2 - 2Fg^{2/3} x^3 + \frac{5}{2} Fgx^4 + \dots,$$

³⁾ Этот результат легко получить, если воспользоваться соотношением $\Delta = \text{div grad}$ и учесть, что $\text{grad } f(r) = f' \mathbf{r}/r$ и $\text{div } \mathbf{r} = N$.

где $x = r - r_0$ и $g = 4F/N^2$, получаем (поступая как и при выводе формулы (Д3.3))

$$E_0(1/\tilde{N}) = \frac{3}{2} Fg^{-1/3} + \frac{1}{2} \sqrt{3Fg^{1/3}} + \frac{1}{72} g^{2/3} + \dots \quad (\text{Д3.12})$$

Отсюда, имея в виду, что

$$g = 4F/(N^2 - 4N + 3) \approx 4FN^{-2} (1 + 4/N + 13/N^2), \quad (\text{Д3.13})$$

приходим к выражению для энергии основного уровня в виде $1/N$ -разложения

$$\begin{aligned} E_0(1/N) &= \frac{3}{2} \left(\frac{FN}{2}\right)^{2/3} \times \\ &\times \left\{ 1 + \frac{1}{N} \left(-\frac{4}{3} + \frac{2}{\sqrt{3}}\right) + \frac{1}{N^2} \left(-\frac{20}{27} + \frac{4}{3\sqrt{3}}\right) + \dots \right\} = \\ &= \frac{3}{2} \left(\frac{FN}{2}\right)^{2/3} \cdot \{1 - 0,17863N^{-1} + 0,02906N^{-2} + \dots\}. \quad (\text{Д3.14}) \end{aligned}$$

Положив $N = 3$, получаем $E_0 = 1,8549F^{2/3}$, что лишь на 0,05 % отличается от точного значения $E_0 = \beta_1(F^2/2)^{1/3} = 1,8558F^{2/3}$ (здесь $-\beta_1 = -2,3381$ — первый нуль функции Эйри, $\text{Ai}(-\beta_1) = 0$; сравнить с 2.8). Отметим также, что применительно к одномерному потенциалу $U = F|x|$ формула (Д3.14) при $N = 1$ дает $E_0 = 0,8036F^{2/3}$, в то время как точное значение $E_0 = 0,8086F^{2/3}$. Столь высокая точность формулы (Д3.14) определяется тем, что в данном случае параметр разложения можно оценить как $\approx 1/5N$.

б) Для потенциала $U = \alpha r^4$, поступая аналогичным образом, находим

$$E_0(1/\tilde{N}) = 3\alpha^{1/3} \left(\frac{\tilde{N}^2}{16}\right)^{2/3} \left\{ 1 + \frac{4\sqrt{6}}{3\tilde{N}} + \frac{44}{27\tilde{N}^2} + \dots \right\}$$

и переходя как в (Д3.13) к параметру разложения $1/N$, получаем

$$\begin{aligned} E_0(1/N) &= 3\alpha^{1/3} \left(\frac{N^2}{16}\right)^{2/3} \times \\ &\times \left\{ 1 + \frac{8(\sqrt{3/2} - 1)}{3N} + \frac{50 - 24\sqrt{6}}{27N^2} + \dots \right\} = \\ &= 3\alpha^{1/3} (N^2/16)^{2/3} \{1 + 0,5993N^{-1} - 0,3255N^{-2} + \dots\} \quad (\text{Д3.15}) \end{aligned}$$

(параметр разложения $\approx 1/2N$). Отсюда, положив $N = 3$, имеем $E_0 = 2,379\alpha^{1/3}$, что отличается от результата точного численного решения уравнения Шредингера, $E_0 = 2,394\alpha^{1/3}$, всего на 0,4 %.

в) Для кулоновского потенциала $U = -\alpha/r$ находим

$$E_0(1/\tilde{N}) = -\frac{2\alpha^2}{\tilde{N}^2} \left(1 - \frac{2}{\tilde{N}} + \frac{2}{\tilde{N}^2} + \dots\right).$$

Переходя, как и выше, к разложению по параметру $1/N$, получаем

$$E_0(1/N) = -2\alpha^2 N^{-2} \{ 1 + 2/N + 3/N^2 + \dots \}. \quad (\text{Д3.16})$$

Здесь по сравнению с (Д3.14) и (Д3.15) сходимость разложения «затягивается». Это разложение можно «улучшить», если воспользоваться параметром разложения $1/(N-1)$. При этом выражение (Д3.16) принимает вид $E_0(1/(N-1)) = -2\alpha^2/(N-1)^2$, что совпадает с точным результатом. Указанное изменение параметра разложения связано с тем, что оно при $N=1$ обеспечивает «падение на центр» (дает $E_0 = -\infty$), возникающее в кулоновском потенциале в одномерном случае, см. 8.61.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1989.
2. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. — М.: Наука, 1983.
3. Давыдов А. С. Квантовая механика. — М.: Наука, 1973.
4. Соколов А. А., Тернов И. М., Жуковский В. Ч. Квантовая механика. — М.: Наука, 1979.
5. Елютин П. В., Кривченков В. Д. Квантовая механика. — М.: Наука, 1976.
6. Мессиа А. Квантовая механика. — М.: Наука, 1978. Т. 1, 1979. Т. 2.
7. Шифф Л. Квантовая механика. — М.: ИЛ, 1957.
8. Коган В. И., Галицкий В. М. Сборник задач по квантовой механике. — М.: Гостехиздат, 1956.
9. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. Сборник задач по квантовой механике. — М.: Гостехиздат, 1957.
10. Флюгге Э. Задачи по квантовой механике. — М.: Мир, 1974, Т.Т. 1, 2.
11. Кронин Дж., Гринберг Д., Телегди В. Сборник задач по физике с решениями. — М.: Атомиздат, 1975.
12. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики. — М.: Наука, 1979.
13. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 1968.
14. Мигдал А. Б. Качественные методы в квантовой теории. — М.: Наука, 1975.
15. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. — М.: Наука, 1971.
16. Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. — М.: Физматгиз, 1960.
17. Бете Г. Квантовая механика. — М.: Мир, 1965.
18. Фок В. А. Начала квантовой механики. — М.: Наука, 1976.
19. Смирнов Б. М. Асимптотические методы в теории атомных столкновений. — М.: Атомиздат, 1973.
20. Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. — Л.: ЛГУ, 1975.
21. Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Атом в сильном световом поле. — М.: Энергоатомиздат, 1984.
22. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. — М.: Мир, 1969.

23. *Гольдбергер М., Ватсон К.* Теория столкновений. — М.: Мир, 1967.
24. *Ньютон Р.* Теория рассеяния волн и частиц. — М.: Мир, 1969.
25. *Тейлор Дж.* Теория рассеяния. — М.: Мир, 1975.
26. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика. — М.: Наука, 1988.
27. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория поля. — М.: Наука, 1988.
28. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Статистическая физика, ч. 2. — М.: Наука, 1978.
29. *Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Квантовая электродинамика. — М.: Наука, 1989.
30. *Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В.* Квантовые поля. — М.: Наука, 1980.
31. *Мигдал А. Б.* Фермионы и бозоны в сильных полях. — М.: Наука, 1978.
32. *Собельман И. И.* Введение в теорию атомных спектров. — М.: Наука, 1977.
33. *Градштейн И. С., Рыжик И. М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. — М.: Физматгиз, 1962.
34. Справочник по специальным функциям. // Под редакцией М. Абрамовица и И. Стиган. — М.: Наука, 1979.
35. *Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф.* Специальные функции; формулы, графнки, таблицы. — М.: Наука, 1977.

V. M. Galitsky, B. M. Karnakov, V. I. Kogan
PROBLEMS IN QUANTUM MECHANICS

Textbook, Second Edition
Moscow, Nauka, Main Editorial Board for Literature
on Physics and Mathematics, 1992.

Readership: Students, teachers, researchers in physics, physical engineering and chemistry.

Summary: A modern textbook on quantum mechanics, containing about 700 problems of various difficulty with solutions. Along with traditional topics the problems represent calculational methods, approximations and models, such as Green functions, potentials of zero radius, perturbation theory with respect to the scattering length etc., used in atomic and nuclear physics for investigation of spectra (including quasi-stationary and quasi-energetical states), the behaviour of systems in external fields and processes of particle collisions. Also presented are problems reflecting the recent development of quantum mechanics and its applications: hadronic atoms, meso-molecular systems and muon catalysis, auto-ionizational states, super-symmetry etc.

Contents: Operators in quantum mechanics. One-dimensional problems. Angular momentum. Particle in central field. Spin. Time dependence of state vector and observables. Particle in magnetic field. Perturbation theory, variational method, sudden and adiabatic approximations. WKB-method. Systems of identical particles. Atoms and molecules. Atomic nucleus. Collision theory. Quantum theory of radiation. Relativistic quantum mechanics.

The authors: Professor Victor Galitsky, Member — Correspondent of the USSR Academy of Sciences, specialist in quantum statistical physics, high-energy particle and radiation theory, nuclear theory etc.

Boris Karnakov, Associate Professor of Moscow Physical — Engineering Institute, specialist in atomic and nuclear theory.

Vladimir Kogan, group head at the Kurchatov Institute of Atomic Energy and Associate Professor of Moscow Physical — Engineering Institute, specialist in radiation theory and plasma physics.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6	
Принятые сокращения	8	
Наиболее часто используемые обозначения	8	
Универсальные константы	9	
		Задачи
		Реше ния
Глава 1. Операторы в квантовой механике	11	194
§ 1. Основные понятия теории линейных операторов	13	194
§ 2. Собственные функции, собственные значения, средние	15	197
§ 3. Проекционные операторы	18	206
§ 4. Элементы теории представлений. Унитарные преобразования	19	207
Глава 2. Одномерное движение	21	212
§ 1. Стационарные состояния дискретного спектра	23	212
§ 2. Уравнение Шрёдингера в импульсном представлении. Функция Грина уравнения Шрёдингера. Интегральная форма уравнения Шрёдингера	27	220
§ 3. Состояния непрерывного спектра. Прохождение через потенциальные барьеры	30	228
§ 4. Системы с несколькими степенями свободы. Частица в периодическом потенциале	33	241
Глава 3. Момент импульса	35	248
§ 1. Общие свойства момента	37	248
§ 2. Момент $L = 1$	40	253
§ 3. Сложение моментов	41	257
§ 4. Тензорный формализм в теории момента	44	264
Глава 4. Движение в центральном поле	46	268
§ 1. Состояния дискретного спектра в центральных полях	47	268
§ 2. Состояния с малой энергией связи. Частица в совместном поле короткодействующего и далекодействующего потенциалов	52	285
§ 3. Системы с аксиальной симметрией	55	293

Глава 5. Спин	56	299
§ 1. Спин $s = 1/2$	58	299
§ 2. Спин-орбитальные состояния частицы со спином $s = 1/2$. Высшие спины	62	309
§ 3. Спиновая (поляризационная) матрица плотности. Угловые распределения и корреляции в распадах	64	318
Глава 6. Изменение состояния во времени	66	324
§ 1. Представление Шрёдингера. Движение волновых пакетов	68	324
§ 2. Изменение во времени физических величин. Интегралы движения	70	332
§ 3. Унитарные преобразования, зависящие от времени. Гейзенберговское представление	72	337
§ 4. Временные функции Грина	74	349
§ 5. Квазистационарные и квазиэнергетические состояния	75	353
Глава 7. Движение в магнитном поле	77	363
§ 1. Стационарные состояния частицы в присутствии магнитного поля	78	363
§ 2. Изменение состояний во времени	81	376
§ 3. Магнитное поле орбитальных токов и спинового магнитного момента	82	380
Глава 8. Теория возмущений. Вариационный метод. Внезапные и адиабатические воздействия	83	383
§ 1. Стационарная теория возмущений (дискретный спектр)	85	383
§ 2. Вариационный метод	88	397
§ 3. Стационарная теория возмущений (непрерывный спектр)	89	405
§ 4. Нестационарная теория возмущений. Переходы в непрерывном спектре	91	414
§ 5. Внезапные воздействия	94	430
§ 6. Адиабатическое приближение	95	434
Глава 9. Квазиклассическое приближение	97	449
§ 1. Квантование энергетического спектра	100	449
§ 2. Квазиклассические волновые функции, вероятности и средние	104	475
§ 3. Прохождение через потенциальные барьеры	106	486
Глава 10. Тождественность частиц. Вторичное квантование	108	501
§ 1. Симметрия волновых функций	110	501
§ 2. Основы формализма вторичного квантования (представление чисел заполнения)	111	508
§ 3. Системы из большого числа $N \gg 1$ частиц	115	521

	Задачи	Решения
Глава 11. Атомы и молекулы	117	532
§ 1. Стационарные состояния атомов с одним и двумя электронами	118	532
§ 2. Многоэлектронные атомы. Статистическая модель атома	121	554
§ 3. Основные представления теории молекул	124	569
§ 4. Атомы и молекулы во внешних полях. Взаимодействие атомных систем	126	580
§ 5. Нестационарные явления в атомных системах	131	606
Глава 12. Атомное ядро	137	638
§ 1. Основные представления о ядерных силах. Дейтрон	140	638
§ 2. Модель оболочек	143	648
§ 3. Изотопическая инвариантность	146	660
Глава 13. Столкновения частиц	148	668
§ 1. Борновское приближение	155	668
§ 2. Фазовая теория рассеяния	159	686
§ 3. Низкоэнергетическое рассеяние. Резонансные явления при рассеянии	160	696
§ 4. Рассеяние быстрых частиц. Приближение эйконала	166	731
§ 5. Рассеяние частиц со спином	167	744
§ 6. Аналитические свойства и унитарность амплитуды рассеяния	170	754
§ 7. Рассеяние составных частиц. Неупругие столкновения	172	762
Глава 14. Квантовая теория излучения . .	176	789
§ 1. Излучение фотонов	180	789
§ 2. Рассеяние фотонов. Излучение фотонов при столкновениях	182	799
Глава 15. Релятивистские волновые уравнения	183	818
§ 1. Уравнение Клейна — Гордона	186	818
§ 2. Уравнение Дирака	190	845
Дополнение	869	
Список литературы	878	