

Министерство образования Российской Федерации
—
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

С. Н. Лыков В. Э. Гасумянц С. А. Рыков

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
Руководство по решению задач
Часть 2

Учебное пособие

Санкт-Петербург
Издательство СПбГПУ
2004

УДК 530.145 (075.8)

Лыков С.Н., Гасумянц В.Э., Рыков С.А. Квантовая механика. Руководство по решению задач. Ч. 2: Учеб. пособие. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2004. 158 с.

Пособие соответствует государственному образовательному стандарту подготовки по направлениям: 550700 «Электроника и микроэлектроника», 551900 «Оптехника», 553100 «Техническая физика», по специальностям 014100 «Микроэлектроника и полупроводниковые приборы», 200100 «Микроэлектроника и твердотельная электроника», 190700 «Оптикоэлектронные приборы и системы», 071400 «Физическая электроника», 071500 «Радиофизика и электроника».

По курсу «Квантовая механика» издано учебное пособие С. Н. Лыкова «Квантовая механика» (СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001) и первая часть руководства по решению задач С.Н.Лыков, В.Э.Гасумянц, С.А.Рыков «Квантовая механика. Руководство по решению задач. Часть 1» (СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003). Настоящее пособие является второй частью дополнения к первому из перечисленных пособий. В нем приведены задачи с решениями, рекомендуемые для изучения на практических занятиях по курсу «Квантовая механика». Главное внимание уделено физическим принципам и иллюстрации примерами реализации этих принципов в математическом аппарате квантовой теории. Задачи сгруппированы по темам, причем их уровень сложности и очередность согласованы с последовательностью изложения лекционного материала.

Предназначено для студентов и аспирантов, изучающих дисциплины «Теоретическая физика», «Физика твердого тела», «Физика полупроводников».

Ил. 14. Библиогр.: 12 назв.

Печатается по решению редакционно-издательского совета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Глава 5. Барьеры. Состояния с непрерывным спектром энергии</i>	3
Задачи.....	3
Решения	5
<i>Глава 6. Задачи об осцилляторах</i>	22
Задачи	23
Решения	25
<i>Глава 7. Момент импульса</i>	52
Задачи	56
Решения	58
<i>Глава 8. Спин</i>	76
Задачи	79
Решения	81
<i>Глава 9. Возмущение, переходы</i>	98
Задачи	102
Решения	105
Библиографический список	155
Список опечаток и исправлений	156

Глава 5. БАРЬЕРЫ. СОСТОЯНИЯ С НЕПРЕРЫВНЫМ СПЕКТРОМ ЭНЕРГИИ

В данной главе мы продолжаем изучать примеры решений уравнения Шредингера. Здесь приведено несколько задач об одномерном движении частицы в поле $U(x)$, имеющем вид резких ступенек. Основной шаг в решении подобных задач – использование условий непрерывности волновой функции и ее производной по обе стороны от точки x , в которой потенциальная энергия частицы претерпевает скачок. Громоздкость этой процедуры при наличии у потенциала нескольких ступенек легко преодолевается с помощью так называемого метода матриц переноса.

Задачи

5.1. Вероятности отражения R и прохождения D частицы, падающей из области 1 на потенциальную стенку, изображенную на рис. 5.1, определяются равенствами

$$R = j_{\text{отр}} / j_{\text{над}}, \quad D = j_{\text{прош}} / j_{\text{над}},$$

где

$$j_{\text{над}} = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2, \quad j_{\text{отр}} = \frac{\hbar k_1}{m} |B_1|^2, \quad j_{\text{прош}} = \frac{\hbar k_2}{m} |A_2|^2;$$

A_n, B_n – коэффициенты, характеризующие в n -ой области волновую функцию $\psi(x)$ стационарного состояния частицы с энергией $\varepsilon = \hbar^2 k_1^2 / 2m$

$$\psi(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x}, \quad n = 1, 2.$$

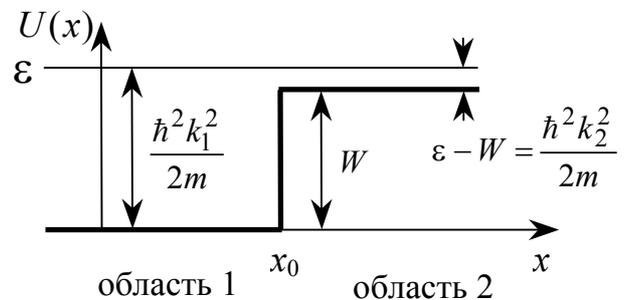


Рис. 5.1

Это позволяет рассматривать величины

$$a_n(x) = \sqrt{k_n} A_n e^{ik_n x} \quad \text{и} \quad b_n(x) = \sqrt{k_n} B_n e^{-ik_n x}$$

как определенные с точностью до нормировочного множителя амплитуды вероятности движения частицы в n -ой области вдоль или против оси x , соответственно.

а) Определить матрицу переноса \hat{t} , связывающую значения $a_2(x_0)$, $b_2(x_0)$ с $a_1(x_0)$, $b_1(x_0)$.

б) Найти матрицу \hat{U} , связывающую $b_1(x_0)$ и $a_2(x_0)$ с $a_1(x_0)$ и $b_2(x_0)$.

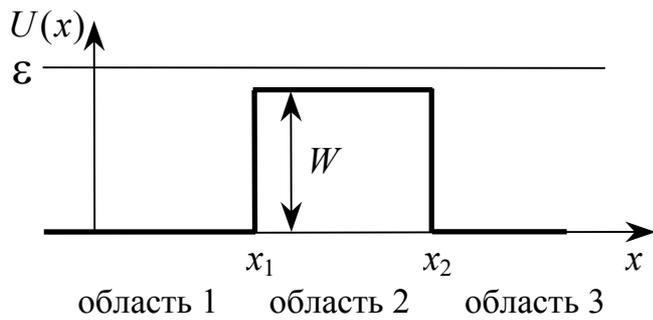


Рис. 5.2

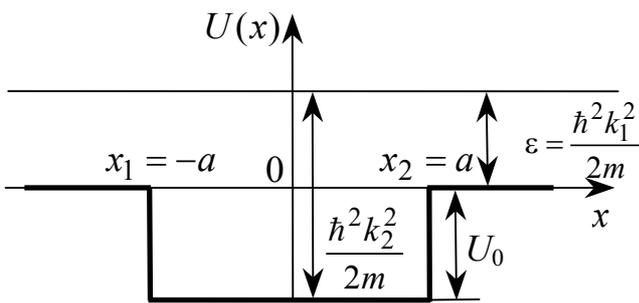


Рис. 5.3

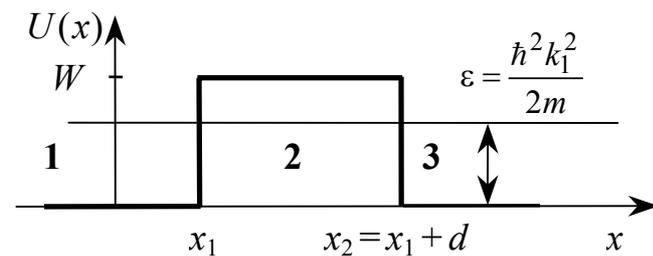


Рис. 5.4

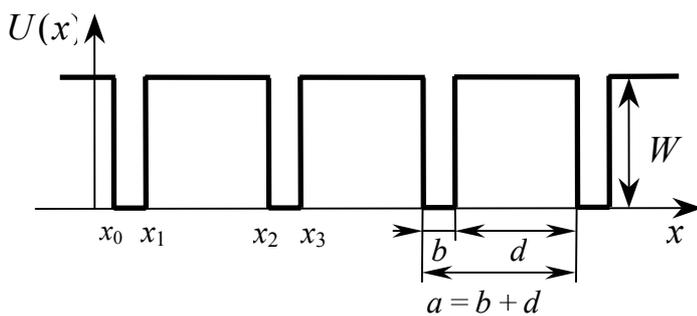


Рис. 5.5

5.2. Найти вероятность прохождения D и вероятность отражения R при одномерном движении частицы над потенциальным барьером протяженностью d (рис. 5.2).

5.3. а) Найти коэффициент прохождения D частицы, совершающей одномерное движение над симметричной потенциальной ямой $U(x)$, изображенной на рис. 5.3.

б) Для стационарных состояний частицы в указанном поле $U(x)$, принадлежащих непрерывной части энергетического спектра, найти волновые функции, обладающие определенной четностью по отношению к преобразованию $x \rightarrow -x$.

5.4. Найти коэффициент прохождения D частицы через потенциальный барьер протяженностью d , изображенный на рис. 5.4, при условии, что энергия частицы ϵ меньше высоты барьера W .

5.5. Получить уравнение для энергетического спектра $\epsilon(q)$ частицы в периодическом потенциале с периодом a , изображенном на рис. 5.5. *Указания.* Воспользоваться представлением о состояниях с

определенным квазиимпульсом (см. задачу 3.8). Ограничиться случаем $\epsilon < W$, где W – высота потенциальных барьеров.

5.6. а) Найти волновые функции стационарных состояний электрона в однородном электрическом поле E при одномерном движении, параллельном направлению поля.

б) Найти волновые функции стационарных состояний и указать способ вычисления уровней энергии для электрона в «треугольной» бесконечной потенциальной яме:

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

Решения

5.1. а) Решение уравнения Шредингера с указанным в условии задачи ступенчатым потенциалом имеет вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}, & x < x_0; \\ A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x}, & x > x_0. \end{cases}$$

Поскольку потенциал нигде не обращается в бесконечность, то сама волновая функция $\psi(x)$ и ее первая производная должны на всей оси x обладать свойством непрерывности. Условия непрерывности $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ в точке $x = x_0$, разграничивающей области 1 и 2, имеют вид

$$\begin{aligned} A_1 e^{ik_1x_0} + B_1 e^{-ik_1x_0} &= A_2 e^{ik_2x_0} + B_2 e^{-ik_2x_0}, \\ ik_1(A_1 e^{ik_1x_0} - B_1 e^{-ik_1x_0}) &= ik_2(A_2 e^{ik_2x_0} - B_2 e^{-ik_2x_0}). \end{aligned} \quad (1)$$

Отсюда для значений «амплитуд вероятности»

$$a_n(x) = \sqrt{k_n} A_n e^{ik_nx}, \quad b_n(x) = \sqrt{k_n} B_n e^{-ik_nx} \quad (2)$$

в точке $x = x_0$ получаем

$$\begin{aligned} a_2(x_0) &= \frac{k_2 + k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} a_1(x_0) + \frac{k_2 - k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} b_1(x_0), \\ b_2(x_0) &= \frac{k_2 - k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} a_1(x_0) + \frac{k_2 + k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} b_1(x_0). \end{aligned}$$

Таким образом, точке $x = x_0$, в которой потенциал $U(x)$ претерпевает скачок, можно сопоставить элементы $t_{jj'}$ матрицы \hat{t} :

$$\begin{aligned} a_2(x_0) &= t_{11} a_1(x_0) + t_{12} b_1(x_0), \\ b_2(x_0) &= t_{21} a_1(x_0) + t_{22} b_1(x_0), \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$t_{11} = t_{22} = \frac{k_2 + k_1}{2\sqrt{k_2 k_1}}, \quad t_{12} = t_{21} = \frac{k_2 - k_1}{2\sqrt{k_2 k_1}}. \quad (4)$$

Отметим, что указанная матрица \hat{t} унимодулярна,

$$t_{11} t_{22} - t_{12} t_{21} = 1, \quad (5)$$

а обратная матрица дается заменой в (4) величин k_1, k_2 на k_2, k_1 .

б) Физическая картина отражения или прохождения частицы через потенциальную ступеньку здесь напоминает ситуацию, рассмотренную в задаче 2.6. С этой точки зрения независимыми амплитудами являются a_1 и b_2 , а амплитуды b_1 и a_2 должны быть с ними связаны посредством некоторой унитарной матрицы \hat{U} :

$$\begin{aligned} b_1 &= U_{11} a_1 + U_{12} b_2, \\ a_2 &= U_{21} a_1 + U_{22} b_2. \end{aligned} \quad (6)$$

Перепишав соотношения (3) в форме (6), находим с учетом (5):

$$\begin{aligned} U_{11} &= -t_{21} / t_{22}, \quad U_{22} = t_{12} / t_{22}, \\ U_{12} &= U_{21} = 1 / t_{22}. \end{aligned} \quad (7)$$

Величина $|U_{21}|^2$ – это коэффициент (вероятность) прохождения D при движении частицы из области 1 в область 2, а $|U_{12}|^2$ – коэффициент прохождения при противоположном направлении движения. Из соотношений (7) видно, что значение D не зависит от направления падения частиц на потенциальную ступеньку:

$$D = |U_{12}|^2 = |U_{21}|^2 = \frac{1}{|t_{22}|^2}. \quad (8)$$

С учетом (4) находим, что коэффициент (вероятность) отражения R также не зависит от направления падения частиц на потенциальную ступеньку:

$$R = |U_{11}|^2 = |U_{22}|^2 = |t_{12} / t_{22}|^2. \quad (9)$$

Подставив в (8), (9) выражения для элементов \hat{t} -матрицы (4), получаем:

$$D = \frac{4k_2k_1}{(k_2 + k_1)^2}, \quad R = \frac{(k_2 - k_1)^2}{(k_2 + k_1)^2}. \quad (10)$$

Как и должно быть, выдерживается равенство $D + R = 1$, подтверждающее допустимость вероятностной интерпретации величин D и R .

5.2. Воспользуемся формализмом матрицы переноса – формулами (2)–(9), приведенными в решении задачи 5.1. Движению частицы над потенциальным барьером, показанным на рис. 5.2, можно сопоставить следующие линейные соотношения:

$$\begin{aligned} a_3(x_2) &= t_{11} a_1(x_1) + t_{12} b_1(x_1), \\ b_3(x_2) &= t_{21} a_1(x_1) + t_{22} b_1(x_1), \end{aligned} \quad (1)$$

где $t_{jj'}$ – элементы матрицы \hat{t} , имеющей вид произведения трех унимодулярных матриц и в силу этого также являющейся унимодулярной:

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} \frac{k_3 + k_2}{2\sqrt{k_3k_2}} & \frac{k_3 - k_2}{2\sqrt{k_3k_2}} \\ \frac{k_3 - k_2}{2\sqrt{k_3k_2}} & \frac{k_3 + k_2}{2\sqrt{k_3k_2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_2d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{k_2 + k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} & \frac{k_2 - k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} \\ \frac{k_2 - k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} & \frac{k_2 + k_1}{2\sqrt{k_2k_1}} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Волновые числа $k_1 = k_3$ и k_2 определяются величиной ε энергии частицы и высотой потенциального барьера W :

$$k_1 = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}, \quad (3)$$

$$k_2 = \sqrt{2m(\varepsilon - W)/\hbar^2}. \quad (4)$$

Диагональная матрица с элементами $e^{\pm ik_2(x_2 - x_1)} = e^{\pm ik_2d}$ описывает изменение величин $a_2(x)$ и $b_2(x)$ от точки x_1 к точке x_2 внутри области 2; два других матричных сомножителя в (2) отвечают изменению таких величин при «переносе» через граничные точки x_1 и x_2 . Вычислив указанное произведение матриц, получим:

$$\hat{t} = \frac{1}{4k_1k_2} \begin{pmatrix} e^{ik_2d}(k_1 + k_2)^2 - e^{-ik_2d}(k_2 - k_1)^2, & e^{ik_2d}(k_2^2 - k_1^2) + e^{-ik_2d}(k_1^2 - k_2^2) \\ e^{ik_2d}(k_1^2 - k_2^2) + e^{-ik_2d}(k_2^2 - k_1^2), & e^{-ik_2d}(k_1 + k_2)^2 - e^{ik_2d}(k_2 - k_1)^2 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Коэффициенты прохождения D и отражения R находим по формулам (8) и (9)

задачи 5.1:

$$D = \frac{1}{|t_{22}|^2} = \left| \frac{4k_1k_2}{e^{-ik_2d}(k_1+k_2)^2 - e^{ik_2d}(k_1-k_2)^2} \right|^2, \quad (6)$$

$$R = \left| \frac{t_{12}}{t_{22}} \right|^2 = \left| \frac{(k_2^2 - k_1^2)(e^{ik_2d} - e^{-ik_2d})}{e^{-ik_2d}(k_1+k_2)^2 - e^{ik_2d}(k_1-k_2)^2} \right|^2. \quad (7)$$

Окончательный результат можно записать так:

$$D = \left(1 + \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2}{4k_1^2k_2^2} \sin^2 k_2d \right)^{-1}, \quad (8)$$

$$R = 1 - D. \quad (9)$$

Отметим, что для целочисленных значений параметра k_2d/π коэффициент прохождения, как видно из формулы (8), равен единице – надбарьерное отражение частицы отсутствует. На качественном уровне это объясняется интерференцией дебройлевских волн, отраженных в одну и ту же сторону границами областей 1,2 и 2,3: когда на удвоенной длине потенциального барьера дебройлевская длина волны частицы $\lambda = 2\pi/k_2$ укладывается целое число раз, такие волны гасят друг друга. При заданной энергии частицы коэффициент прохождения D как функция протяженности барьера d периодически меняется от значения $D_{\min} = 4k_1^2k_2^2/(k_1^2 + k_2^2)^2$ до $D_{\max} = 1$ с периодом, равным $\lambda/2$.

5.3. а) Определив волновые числа формулами

$$k_1 = k_3 = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}, \quad k_2 = \sqrt{2m(\varepsilon + U_0)/\hbar^2}, \quad (1)$$

где ε – энергия частицы, U_0 – глубина потенциальной ямы (с шириной $d = 2a$), можем непосредственно воспользоваться результатами (8), (9) задачи 5.2:

$$D = \left(1 + \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2}{4k_1^2k_2^2} \sin^2 2k_2a \right)^{-1}, \quad (2)$$

$$R = 1 - D. \quad (3)$$

При целочисленных значениях параметра $2k_2a/\pi$ коэффициент прохождения (2) становится равным единице.

б) Значения ε , принадлежащие области непрерывного энергетического спектра и отвечающие инфинитному движению частицы в обоих направлениях оси x , двукратно вырождены [1]. Действительно, в рассматриваемом примере решение $\psi(x)$ уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon - U(x))\psi = 0$$

с потенциалом, показанным на рис. 5.3., записывается в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}, & x < -a \\ A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x}, & -a < x < a \\ A_3 e^{ik_3x} + B_3 e^{-ik_3x}, & x > a \end{cases}. \quad (4)$$

Условия непрерывности волновой функции $\psi(x)$ и ее производной $\psi'(x)$ в точке $x = x_1$ приводят к линейной связи коэффициентов A_1, B_1 с A_2, B_2 ; эту связь легко выразить посредством матрицы $\sqrt{k_2/k_1} \hat{t}^{-1}$, где \hat{t} – матрица (4) в задаче 5.1:

$$\begin{pmatrix} A_1 e^{ik_1x_1} \\ B_1 e^{-ik_1x_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (k_1 + k_2)/2k_1 & (k_1 - k_2)/2k_1 \\ (k_1 - k_2)/2k_1 & (k_1 + k_2)/2k_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 e^{ik_2x_1} \\ B_2 e^{-ik_2x_1} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Условия непрерывности $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ в точке $x = x_2$ аналогично ведут к линейной связи A_3, B_3 с A_2, B_2 :

$$\begin{pmatrix} A_3 e^{ik_1x_2} \\ B_3 e^{-ik_1x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (k_1 + k_2)/2k_1 & (k_1 - k_2)/2k_1 \\ (k_1 - k_2)/2k_1 & (k_1 + k_2)/2k_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 e^{ik_2x_2} \\ B_2 e^{-ik_2x_2} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Таким образом, удовлетворяющее необходимым требованиям непрерывности решение (4) допускает представление в виде суперпозиции *двух линейно независимых решений* вида $\psi_A(x)$ и $\psi_B(x)$, получающихся при выборе в (4) значений коэффициентов $A_2 = 1, B_2 = 0$, или $A_2 = 0, B_2 = 1$, соответственно:

$$\psi(x) = A_2 \psi_A(x) + B_2 \psi_B(x). \quad (7)$$

Это и означает наличие двукратного вырождения значений ε .

Произвольные коэффициенты A_2 и B_2 становятся вполне определенными, если волновую функцию (4) подчинить условию нормировки и некоторому дополнительному граничному условию; последнее, как правило, вытекает из физического контекста рассматриваемой задачи. Например, для

нахождения плотности потока частиц $j_{отр}$, отражающихся от потенциального барьера в область 1, следует выбрать условие $B_3 = 0$, означающее отсутствие потока частиц, направленного к барьеру из области 3; при этом двукратному вырождению соответствует возможность рассматривать аналогичную задачу с условием $A_1 = 0$ – об отражении частиц в область 3 при отсутствии частиц, падающих на барьер из области 1. Встречаются задачи и другого типа. Так, при описании процессов возбуждения частицы из состояния с дискретным уровнем энергии в симметричной яме в состояния непрерывного спектра существенны решения, обладающие определенной четностью относительно замены $x \rightarrow -x$. В силу двукратного вырождения значений ε , принадлежащих непрерывной части энергетического спектра, каждому такому ε можно сопоставить одно четное ($\psi_{чет}$) и одно нечетное ($\psi_{неч}$) решения вида (4).

Для построения нечетной волновой функции положим $A_2 = -B_2$. Воспользуемся обозначением

$$A_2 = -B_2 = C/2i, \quad (8)$$

где C – вещественная постоянная. Тогда искомая $\psi_{неч}(x)$ в области $-a < x < a$ примет вид вещественной функции $C \sin k_2 x$. Подставив (8) в соотношения (5), (6) и выразив таким образом все коэффициенты A_n и B_n в (4) через нормировочную постоянную C , получим:

$$\psi_{неч}(x) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} + A^* e^{-ik_1 x}, & x < -a \\ C \sin k_2 x, & -a < x < a \\ -A^* e^{ik_1 x} - A e^{-ik_1 x}, & x > a \end{cases}, \quad (9)$$

где

$$A = -e^{ik_1 a} \frac{C}{2} \left(\sin k_2 a + i \frac{k_2}{k_1} \cos k_2 a \right). \quad (10)$$

Для построения четной волновой функции примем вместо (8) условие

$$A_2 = B_2 = C/2. \quad (11)$$

Действуя как и в предыдущем случае, получим

$$\psi_{чет}(x) = \begin{cases} B e^{ik_1 x} + B^* e^{-ik_1 x}, & x < -a \\ C \cos k_2 x, & -a < x < a \\ B^* e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, & x > a \end{cases}, \quad (12)$$

где

$$B = e^{ik_1a} \frac{C}{2} \left(\cos k_2a - i \frac{k_2}{k_1} \sin k_2a \right). \quad (13)$$

Найденные функции вещественны, их графики изображены на рис. 5.6 и 5.7.

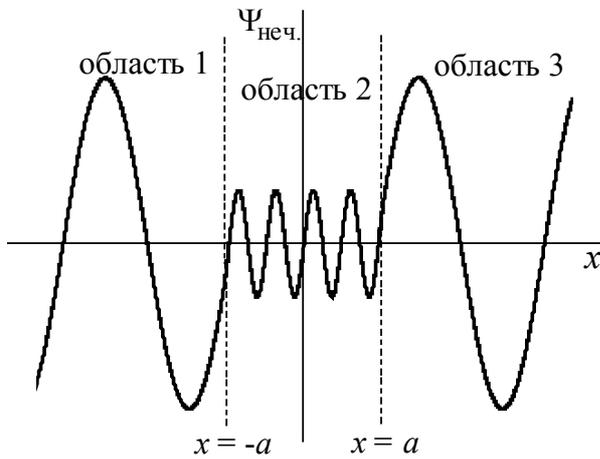


Рис. 5.6

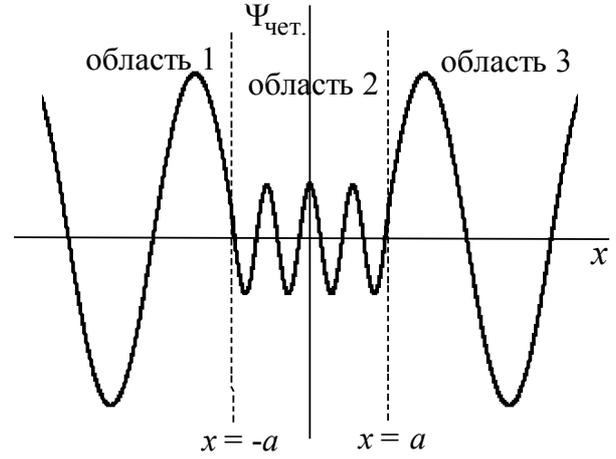


Рис. 5.7

Отметим, что при фиксированном каком-либо нормировочным условием размахе осцилляций волновой функции вне области 2 значения волновой функции внутри области 2 в общем случае имеют заметно меньшую величину. Указанное различие особенно существенно при $k_1 \ll k_2$, когда в (10) или (13) доминирует член, пропорциональный k_2/k_1 . Это означает, что при малой энергии ($\varepsilon = \hbar^2 k_1^2 / 2m \ll U_0$) плотность вероятности обнаружения частицы в области потенциальной ямы в общем случае существенно меньше, чем вне ямы. Соответственно, из выражений (2) и (3) следует, что коэффициент прохождения через область 2 при $k_1 \rightarrow 0$ стремится к нулю, а коэффициент отражения частицы от стенок потенциальной ямы стремится к единице.

Исключение представляют случаи, в которых производная волновой функции на границах ямы обращается в нуль, так что размах осцилляций волновой функции оказывается одним и тем же во всех областях оси x . В этих случаях член с k_2/k_1 в (10) или (13) равен нулю. Для состояния с нечетной волновой функцией так происходит при выполнении условия

$$\cos k_2a = 0, \quad (14)$$

то есть при условии, что на длине потенциальной ямы $d = 2a$ половина дебройлевской длины волны $\lambda/2 = \pi/k_2$ укладывается нечетное число раз. Для состояния с четной волновой функцией подобный «резонанс» наступает в случае

$$\sin k_2 a = 0 , \quad (15)$$

то есть при условии, что на длине ямы величина $\lambda/2$ укладывается четное число раз. Именно в случаях (14) и (15) коэффициент прохождения D становится равным единице.

В завершение рассмотрим некоторые из возможных способов нормировки волновой функции, относящейся к непрерывному энергетическому спектру.

Обозначив посредством δ фазу комплексной величины (10), запишем нечетную волновую функцию (9) в виде

$$\psi_{\text{неч}}(x) = \begin{cases} 2|A| \cos(k_1 x + \delta), & x < -a \\ C \sin k_2 x, & -a < x < a \\ -2|A| \cos(k_1 x - \delta), & x > a \end{cases} . \quad (16)$$

Нормировочный интеграл для $\psi_{\text{неч}}(x)$ представляет собой сумму вкладов от трех областей оси x :

$$\langle \psi | \psi \rangle = 4|A|^2 \int_{-\infty}^{-a} dx \cos^2(k_1 x + \delta) + |C|^2 \int_{-a}^a dx \sin^2 k_2 x + 4|A|^2 \int_a^{\infty} dx \cos^2(k_1 x - \delta) . \quad (17)$$

Два из трех указанных вкладов расходятся при $x \rightarrow \pm\infty$. Пренебрегая конечным вкладом области 2 по сравнению с бесконечно большими вкладами областей 1, 3 и считая, что волновые функции рассматриваются на интервале $-L/2 < x < L/2$, где L – стремящаяся к бесконечности длина суммарного интервала интегрирования в (17), можно записать вместо правой части (17) более простое выражение

$$\langle \psi | \psi \rangle = 4|A|^2 \int_{-L/2}^0 dx \cos^2(k_1 x + \delta) + 4|A|^2 \int_0^{L/2} dx \cos^2(k_1 x - \delta) .$$

Заменив в каждом из этих интегралов квадрат косинуса его средним значением, равным $1/2$, получим

$$\langle \psi | \psi \rangle = 2|A|^2 L . \quad (18)$$

Один из возможных способов нормировки сводится к наложению условия $\langle \psi | \psi \rangle = 1$; это *нормировка на единицу в интервале L* . С учетом (18) указанное условие дает:

$$|A|^2 = 1/2 L . \quad (19)$$

В этом случае волновая функция содержит нормировочный параметр L (она пропорциональна $1/\sqrt{L}$), однако в окончательных выражениях для величин, имеющих непосредственный физический смысл, зависимость от произвольного параметра L должна исчезать.

Более предпочтительной может быть *нормировка на дельта-функцию от волнового числа k_1* :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{k_1}(x)^* \psi_{k'_1}(x) = 2\pi \delta(k_1 - k'_1) . \quad (20)$$

Здесь волновым функциям приписан индекс k_1 , поскольку рассматриваемые состояния характеризуются определенными значениями волнового числа k_1 наряду с определенными значениями энергии:

$$\varepsilon = \hbar^2 k_1^2 / 2m . \quad (21)$$

При $k'_1 \neq k_1$ правая сторона равенства (20) обращается в нуль, что обусловлено взаимной ортогональностью функций $\psi_{k'_1}$ и ψ_{k_1} . При $k'_1 = k_1$ интеграл в левой части (20) представляет собой нормировочный интеграл, и его можно отождествить с выражением (18), а правая часть равенства (20) есть $2\pi \delta(0) = L$ – согласно пояснениям к формуле (10) в задаче 4.3. Таким образом, для выполнения нормировочного условия (20) следует принять, что $2|A|^2 L = L$, то есть

$$|A|^2 = 1/2 . \quad (22)$$

Рассмотрим также условие *нормировки на дельта-функцию от энергии*:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{k_1}(x)^* \psi_{k'_1}(x) = \delta(\varepsilon - \varepsilon') . \quad (23)$$

Разложим ε в аргументе дельта-функции в ряд по степеням $k_1 - k'_1$,

$$\varepsilon = \varepsilon' + \left. \frac{d\varepsilon}{dk_1} \right|_{k_1=k'_1} (k_1 - k'_1) + \dots ,$$

и удержим только первые два члена ряда. Получаем

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon') = \delta\left(\frac{d\varepsilon}{dk_1}(k_1 - k'_1)\right) = \frac{1}{|d\varepsilon/dk_1|} \delta(k_1 - k'_1) ,$$

так что условие (23) принимает вид

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{k_1}(x)^* \psi_{k'_1}(x) = \frac{m}{\hbar^2 k_1} \delta(k_1 - k'_1) . \quad (24)$$

Сравнивая (24) с (20), видим, что для перехода к (24) достаточно правую сторону равенства (22), полученного из нормировочного условия (20), умножить на $m/2\pi\hbar^2 k_1$. Таким образом, нормировка на δ -функцию от энергии имеет место при

$$|A|^2 = \frac{m}{2\pi\hbar^2 k_1} . \quad (25)$$

После того как для $|A|^2$ будет принято одно из нормировочных значений (19), (22) или (25), вещественный коэффициент C в (9) определится в соответствии с (10) равенством

$$C^2 = \frac{4|A|^2 k_1^2}{k_1^2 \sin^2 k_2 a + k_2^2 \cos^2 k_2 a} . \quad (26)$$

Аналогично производится нормировка четного решения (12). Одно из значений (19), (22) или (25) в этом случае следует приписать величине $|B|^2$, после чего коэффициент C в (12) определится в соответствии с (13) равенством

$$C^2 = \frac{4|B|^2 k_1^2}{k_1^2 \cos^2 k_2 a + k_2^2 \sin^2 k_2 a} . \quad (27)$$

5.4. При $\varepsilon < W$ решение уравнения Шредингера имеет вид

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & x < x_1 \\ A_2 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x}, & x_1 < x < x_2 \\ A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, & x > x_2 \end{cases} , \quad (1)$$

где

$$k = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2} , \quad \kappa = \sqrt{2m(W - \varepsilon)/\hbar^2} . \quad (2)$$

Поскольку на волновую функцию здесь налагаются те же условия непрерывности, что и в задаче 5.2, можно воспользоваться формулами (5)–(9) указанной задачи, положив в этих формулах

$$k_1 = k , \quad k_2 = i\kappa . \quad (3)$$

Так, для матрицы «переноса» из точки $x_1 - 0$ в точку $x_2 + 0$ получим

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} -\frac{k^2 - \kappa^2}{2ik\kappa} \operatorname{sh} kd + \operatorname{ch} kd & \frac{k^2 + \kappa^2}{2ik\kappa} \operatorname{sh} kd \\ -\frac{k^2 + \kappa^2}{2ik\kappa} \operatorname{sh} kd & \frac{k^2 - \kappa^2}{2ik\kappa} \operatorname{sh} kd + \operatorname{ch} kd \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Искомая вероятность прохождения частицы D принимает вид:

$$D = \left(1 + \frac{(k^2 + \kappa^2)^2}{4k^2\kappa^2} \operatorname{sh}^2 kd \right)^{-1}. \quad (5)$$

Проникновение частицы с энергией ε через потенциальный барьер W при условии $\varepsilon < W$ называется *туннельным эффектом*. Из (5) следует, что в случае достаточно широкого или высокого барьера, когда выполняется неравенство $kd \gg 1$, вероятность туннелирования D мала и экспоненциально убывает с ростом параметра kd :

$$D \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa d}. \quad (6)$$

5.5. Воспользуемся методом матрицы переноса (см. предыдущие примеры, начиная с задачи 5.1). Обозначим показанные на рис.5.5 интервалы (x_0, x_1) , (x_1, x_2) и (x_2, x_3) как n -, $(n+1)$ - и $(n+2)$ -области оси x . Тогда, в силу непрерывности волновой функции и ее производной на границах областей, должно иметь место равенство:

$$\begin{pmatrix} a_{n+2}(x_3) \\ b_{n+2}(x_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n(x_1) \\ b_n(x_1) \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Здесь a_n и b_n – функции, связанные с решением уравнения Шредингера в области n согласно формулам (2) задачи 5.1, T_{jj} – элементы унимодулярной матрицы \hat{T} , имеющей вид

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{ikb} & 0 \\ 0 & e^{-ikb} \end{pmatrix} \hat{t}, \quad (2)$$

\hat{t} – матрица из формулы (4) задачи 5.4, соответствующая «переносу» из точки $x_1 - 0$ в точку $x_2 + 0$. Диагональная матрица в (2) сопоставлена переносу из точки $x_2 + 0$ в точку $x_3 - 0$, так что матрица \hat{T} описывает изменение значений

волновой функции при изменении x на величину, равную периоду a потенциала $U(x)$. Выполнив указанное в (2) перемножение матриц, получим:

$$T_{11} = -e^{ikb} \frac{k^2 - \kappa^2}{2ik\kappa} \operatorname{sh} \kappa d + e^{ikb} \operatorname{ch} \kappa d, \quad (3)$$

$$T_{12} = e^{ikb} \frac{k^2 + \kappa^2}{2ik\kappa} \operatorname{sh} \kappa d, \quad (4)$$

$$T_{21} = T_{12}^*, \quad (5)$$

$$T_{22} = T_{11}^*, \quad (6)$$

где k и κ связаны с энергией ε формулами (2) задачи 5.4.

Следует ожидать, что в силу трансляционной симметрии стационарными состояниями частицы в периодическом поле являются состояния $|q\rangle$ с определенным квазиимпульсом q , а допустимые значения энергии представляются некоторой функцией $\varepsilon(q)$, периодической с периодом $2\pi\hbar/a$. Подобная картина была рассмотрена нами в задаче 3.8. Основываясь на том рассмотрении покажем теперь, что

$$\langle x+a|q\rangle = e^{iqa/\hbar} \langle x|q\rangle. \quad (7)$$

Скалярно умножив вектор состояния с определенным квазиимпульсом $|q\rangle$ на вектор состояния с определенной координатой $|x+a\rangle = \hat{T}_1|x\rangle$, где \hat{T}_1 – унитарный оператор переноса квантовых состояний на расстояние $\Delta x = a$, и учитывая, что состояния с определенным квазиимпульсом являются собственными для оператора \hat{T}_1 ,

$$\hat{T}_1|q\rangle = e^{-iqa/\hbar}|q\rangle,$$

получаем

$$\langle x+a|q\rangle = \langle \hat{T}_1 x | q \rangle = \langle x | \hat{T}_1^{-1} | q \rangle = e^{iqa/\hbar} \langle x | q \rangle.$$

Таким образом, справедливо соотношение (7).

Согласно этому соотношению волновая функция $\psi_q(x)$ состояния с определенным квазиимпульсом при изменении координаты x на величину, равную периоду трансляционной симметрии a , приобретает фазовый множитель $\exp(iqa/\hbar)$

$$\psi_q(x+a) = e^{iqa/\hbar} \psi_q(x). \quad (8)$$

Отсюда следует, что

$$\Psi_q(x) = u_q(x) e^{iqx/\hbar},$$

где $u_q(x)$ – периодическая функция координаты x с периодом a . Это утверждение (и его обобщения на случаи двумерных или трехмерных систем, подробно рассматриваемые в курсе квантовой теории твердого тела) называют *теоремой Блоха*.

Вследствие (8) величины $a_{n+2}(x_3)$ и $b_{n+2}(x_3)$ в левой стороне равенства (1) должны совпадать с умноженными на $e^{iqa/\hbar}$ величинами $a_n(x_1)$ и $b_n(x_1)$:

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = e^{iqa/\hbar} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Другими словами, a_n и b_n удовлетворяют системе однородных линейных уравнений

$$\begin{pmatrix} T_{11} - e^{iqa/\hbar} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} - e^{iqa/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Условие существования нетривиального решения такой системы имеет вид:

$$\det \begin{pmatrix} T_{11} - e^{iqa/\hbar} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} - e^{iqa/\hbar} \end{pmatrix} = 0,$$

или, с учетом унимодулярности \hat{T} -матрицы ($T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21} = 1$),

$$e^{2iqa/\hbar} - (T_{11} + T_{22})e^{iqa/\hbar} + 1 = 0. \quad (11)$$

Разделив обе стороны уравнения (11) на $e^{iqa/\hbar}$, получаем:

$$\frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}) = \cos(qa/\hbar). \quad (12)$$

Это и есть искомое уравнение для $\varepsilon(q)$; его можно представить в виде

$$F(\varepsilon) = \cos(qa/\hbar), \quad (13)$$

где, с учетом (3) и (6),

$$F(\varepsilon) \equiv \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}) = \frac{\kappa^2 - k^2}{2k\kappa} \sin kb \operatorname{sh} \kappa d + \cos kb \operatorname{ch} \kappa d, \quad (14)$$

$$k = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}, \quad \kappa = \sqrt{2m(W - \varepsilon)/\hbar^2}. \quad (15)$$

Характер решений уравнения (13) сравнительно легко пояснить в случае потенциала с достаточно широкими барьерами, когда $\kappa d \gg 1$. При этом (14) заменяется приближенным выражением

$$\begin{aligned} F(\varepsilon) &\approx \frac{\kappa^2 - k^2}{4k\kappa} \sin kb e^{\kappa d} + \frac{1}{2} \cos kb e^{\kappa d} = \\ &= \cos^2 \frac{kb}{2} \left(\operatorname{tg} \frac{kb}{2} + \frac{k}{\kappa} \right) \left(\frac{\kappa}{k} - \operatorname{tg} \frac{kb}{2} \right) \frac{1}{2} e^{\kappa d}, \end{aligned}$$

и уравнение (13) принимает вид

$$\cos^2 \frac{kb}{2} \left(\operatorname{tg} \frac{kb}{2} + \frac{k}{\kappa} \right) \left(\frac{\kappa}{k} - \operatorname{tg} \frac{kb}{2} \right) = 2e^{-\kappa d} \cos \frac{qa}{\hbar}. \quad (16)$$

Поскольку $e^{-\kappa d} \rightarrow 0$ при $\kappa d \rightarrow \infty$, уравнение (16) в пределе бесконечно широких барьеров ($d \rightarrow \infty$) сводится к условию

$$\left(\operatorname{tg} \frac{kb}{2} + \frac{k}{\kappa} \right) \left(\frac{\kappa}{k} - \operatorname{tg} \frac{kb}{2} \right) = 0. \quad (17)$$

Таким условием, согласно формулам (1) и (2) задачи 4.9, определяется дискретный спектр энергетических уровней ε_n в одиночной прямоугольной потенциальной яме глубиной W и шириной b . Считая теперь $e^{-\kappa d}$ малой, но конечной величиной, заключаем, что решения $\varepsilon_n(q)$ уравнения (16) образуют на оси энергии *зоны* – не перекрывающиеся друг с другом интервалы, лежащие вблизи энергетических уровней ε_n одиночной ямы.

Зоны оказываются «узкими» в меру малости величины $e^{-\kappa d}$, и поэтому закон дисперсии в них – зависимость энергии от q – легко установить, заменив функцию $F(\varepsilon)$ первыми членами ее разложения в ряд Тейлора по степеням $(\varepsilon - \varepsilon_n)$:

$$F(\varepsilon) \approx F(\varepsilon_n) + F'(\varepsilon_n)(\varepsilon - \varepsilon_n).$$

Учитывая равенство $F(\varepsilon_n) = 0$, обусловленное тем, что уровни ε_n , по существу, и определяются уравнением $F(\varepsilon) = 0$, имеем в рассматриваемом приближении:

$$\varepsilon_n(q) = \varepsilon_n + \frac{1}{F'(\varepsilon_n)} \cos \frac{qa}{\hbar}. \quad (18)$$

В случае широких и высоких барьеров ($\kappa d \gg 1$, $\kappa/k \gg 1$) несложное вычисление дает:

$$\frac{1}{F'(\varepsilon_n)} \approx (-1)^{n+1} \frac{2\varepsilon_n}{kb} \sqrt{D}, \quad (19)$$

где величина

$$D \approx 16(k/\kappa)^2 e^{-2\kappa d} \quad (20)$$

представляет собой вероятность туннельного проникновения частицы через высокий потенциальный барьер; значения k и κ берутся при $\varepsilon = \varepsilon_n$. Видно, что коэффициент (19), определяющий энергетическую ширину n -ой зоны, отрицателен для четных зон (порожденных уровнями $\varepsilon_0, \varepsilon_2, \dots$, где ε_0 – уровень основного состояния в одиночной яме) и положителен для нечетных зон. Энергетическая ширина n -ой зоны имеет порядок $\varepsilon_n D^{1/2}$; она

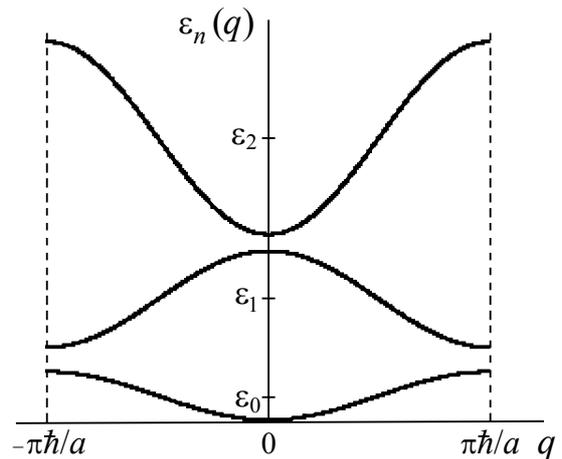


Рис. 5.8

растет с ростом номера зоны, так как экспоненциально малый коэффициент подбарьерного прохождения D с повышением энергии частицы существенно увеличивается. Полученные результаты находятся в качественном соответствии с картиной, рассматривавшейся в задаче 3.8.

В общем случае решение уравнения (13) также имеет «зонный» характер. Отмеченные выше черты такого решения схематически представлены на рис. 5.8.

5.6. а) Электрон движется в однородном силовом поле $F = eE$, которому соответствует потенциальная энергия

$$U(x) = -Fx. \quad (1)$$

Уравнение Шредингера с потенциалом (1) имеет вид

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon + Fx)\psi(x) = 0. \quad (2)$$

Считая, что постоянная F – положительная величина, воспользуемся масштабом длины

$$x_0 = (\hbar^2 / 2mF)^{1/3}$$

и перейдем к безразмерной координатной переменной ξ следующим образом:

$$\xi = \frac{1}{x_0} \left(x + \frac{\varepsilon}{F} \right). \quad (3)$$

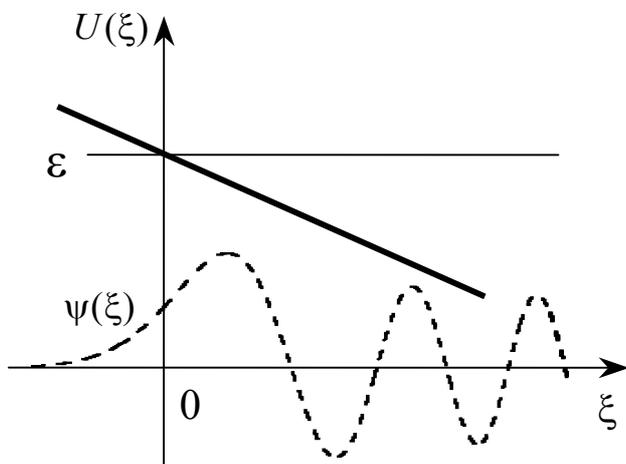


Рис. 5.9

Поскольку поле (1) не является потенциальной ямой, энергетический спектр должен быть непрерывным. Координата (3) выбрана так, что при любом заранее заданном значении энергии ε в точке $\xi = 0$ имеем $U = \varepsilon$ (см. рис. 5.9).

Уравнение (2) принимает вид

$$\psi''(\xi) + \xi\psi(\xi) = 0. \quad (4)$$

Общее решение $\varphi(\xi)$ уравнения (4), как известно из литературы по специальным функциям, можно

представить линейной комбинацией функций Эйри $Ai(z)$ и $Bi(z)$:

$$\varphi(\xi) = C_1 Ai(-\xi) + C_2 Bi(-\xi). \quad (5)$$

Функция $Ai(-\xi)$ конечна при $-\infty < \xi < \infty$; она монотонно убывает при устремлении координаты ξ в область значений $\xi < 0$ и осциллирует в области $\xi > 0$. Именно такого поведения мы ждем от волновой функции стационарного состояния частицы в поле, показанном на рис. 5.9 (график ψ схематично изображен пунктирной линией). Функция же $Bi(-\xi)$ неограниченно возрастает при $\xi \rightarrow -\infty$, и поэтому коэффициент C_2 в (5) следует выбрать равным нулю.

Таким образом, искомые волновые функции стационарных состояний имеют вид:

$$\psi(x) = C Ai\left(-\frac{(x + \varepsilon/F)}{x_0}\right), \quad (6)$$

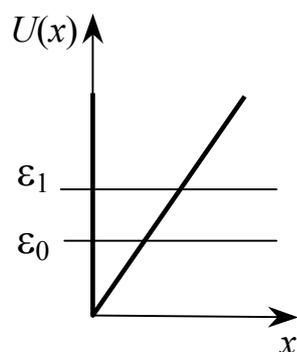


Рис. 5.10

где C – нормировочная постоянная. Более детальное обсуждение рассмотренной задачи читатель может найти в [1,7].

б) Учитывая отрицательный знак заряда электрона, запишем указанный в условии задачи потенциал в виде:

$$U(x) = \begin{cases} Fx, & x > 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases}, \quad (7)$$

где $F \equiv -eE = |e|E > 0$ (см. рис.5.10).

Следует считать, что $\psi(x) = 0$ при $x < 0$, причем в точке $x = 0$ не требуется непрерывности производной волновой функции, а лишь налагается граничное условие, обеспечивающее непрерывность самой волновой функции $\psi(x)$:

$$\psi(0) = 0 . \quad (8)$$

С помощью новой координатной переменной

$$\xi = \frac{1}{x_0} \left(x - \frac{\varepsilon}{F} \right) , \quad (9)$$

где

$$x_0 = (\hbar^2 / 2mF)^{1/3} ,$$

уравнение Шредингера приводится к виду

$$\psi''(\xi) - \xi \psi(\xi) = 0 . \quad (10)$$

Общее решение уравнения (10) представляется линейной комбинацией функций Эйри $Ai(\xi)$ и $Bi(\xi)$. Однако последняя из указанных функций неограниченно возрастает при $\xi \rightarrow \infty$, так что, в силу условия ограниченности искомых решений уравнения Шредингера, необходимо коэффициент при $Bi(\xi)$ выбрать равным нулю. Таким образом, конечное при всех значениях x решение уравнения (10) имеет вид

$$\psi(x) = C Ai((x - \varepsilon / F) / x_0) . \quad (11)$$

Граничное условие (8) с учетом (11) играет роль уравнения, которым определяется энергетический спектр частицы в поле (7):

$$Ai(-\varepsilon / F x_0) = 0 . \quad (12)$$

Из (12) следует, что уровни энергии ε_n даются формулой

$$\varepsilon_n = -F x_0 \xi_n = (\hbar^2 F^2 / 2m)^{1/3} (-\xi_n) , \quad (13)$$

где $\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots$ – корни уравнения $Ai(\xi) = 0$ (нули функции Эйри). Значения ξ_n отрицательны, так как функция $Ai(\xi)$ имеет осциллирующий характер при $\xi < 0$. Подставляя допустимые значения энергии (13) в (11), получаем последовательность волновых функций стационарных состояний частицы в поле (7):

$$\psi_n(x) = C Ai((x - \varepsilon_n / F) / x_0) . \quad (14)$$

Постоянная C определяется из условия нормировки волновой функции на единицу.

Глава 6. ЗАДАЧИ ОБ ОСЦИЛЛЯТОРАХ

К представлению о гармоническом осцилляторе приводит рассмотрение динамики физической системы вблизи ее положения устойчивого равновесия. В точке равновесия потенциальная энергия системы имеет минимум. Поэтому зависимость потенциальной энергии от координаты x , характеризующей отклонение от положения равновесия, в первом приближении по степеням такой координаты является квадратичной:

$$U(x) = Kx^2 / 2, \quad K > 0. \quad (I)$$

В случае частицы массы m ее одномерное движение с потенциальной энергией (I) в классической механике представляет собой гармоническое колебание с частотой

$$\omega_0 = \sqrt{K/m}. \quad (II)$$

В связи с этим выражение (I) называют потенциалом гармонического осциллятора (*oscillate* – на английском означает колебаться, вибрировать). В классической механике полная энергия осциллятора ε – сумма кинетической энергии и потенциальной – может принимать любое значение, что соответствует возможности задать произвольную величину амплитуды колебаний (при этом для применимости приближения (I) амплитуда колебаний осциллятора, конечно, должна быть достаточно малой). В квантовой же механике все стационарные состояния осциллятора принадлежат дискретным уровням энергии:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots. \quad (III)$$

Отличительной чертой энергетического спектра гармонического осциллятора в квантовой механике является то, что уровни энергии (III) расположены через равные интервалы $\hbar\omega_0$. Этот факт играет фундаментальную роль во многих задачах о динамике сложных систем вблизи точки минимума энергии, позволяя ввести представление о «квазичастицах» – квантах энергии $\hbar\omega_k$, отвечающих различным колебательным модам системы (k – номер моды).

В квантовой механике классическая картина колебаний осциллятора $x(t)$ утрачивает смысл. Когда говорят о колебаниях квантового осциллятора, например, вдоль оси x , то обычно имеют ввиду стационарные состояния, описываемые волновыми функциями $\psi_n(x)$. Явный вид таких функций указан ниже в решениях задач.

Задачи

6.1. Линейный осциллятор с электрическим зарядом q помещен в однородное электрическое поле \mathbf{E} , направленное вдоль оси колебаний.

а) Определить энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний.

б) Найти поляризуемость стационарных состояний. *Указание.* Поляризуемостью β определяется в линейном приближении по слабому внешнему полю \mathbf{E} индуцированный этим полем дипольный электрический момент ($\mathbf{d} = \beta \mathbf{E}$), а также, в квадратичном приближении, – сдвиг энергетического уровня: $\Delta \varepsilon = -\beta E^2 / 2$.

6.2 а) Найти уровни энергии и волновые функции $\psi(x, y, z)$ стационарных состояний частицы массы m , совершающей трехмерное движение в поле

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (K_1 x^2 + K_2 y^2 + K_3 z^2),$$

где K_j – заданные положительные параметры. Имеют ли волновые функции определенную четность по отношению к преобразованию $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$?

б) Определить кратность вырождения энергетических уровней в случае, когда указанное поле $U(\mathbf{r})$ обладает осью вращательной симметрии: $K_1 = K_2 \neq K_3$.

в) Определить кратность вырождения также в том случае, когда указанное поле обладает сферической симметрией: $K_1 = K_2 = K_3$.

6.3 Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в поле

$$U(x, y, z) = \frac{m \omega_0^2}{2} \left(x^2 + \frac{y^2 + z^2}{2} + yz \right).$$

6.4 Найти распределение вероятности для значений импульса в стационарных состояниях линейного осциллятора.

6.5. Найти энергетический спектр и волновые функции $\psi(x, y, z)$ стационарных состояний бесспиновой частицы с электрическим зарядом q в однородном магнитном поле \mathbf{B} . Поле задано посредством векторного потенциала \mathbf{A} с компонентами $A_x = -yB$, $A_y = A_z = 0$.

6.6. Убедиться в том, что решения уравнения Шредингера для частицы в однородном магнитном поле, задаваемом потенциалом \mathbf{A} с компонентами

$$A_x = -yB, \quad A_y = A_z = 0,$$

могут быть получены посредством калибровочного преобразования решений, отвечающих потенциалу $\tilde{\mathbf{A}}$ с компонентами

$$\tilde{A}_y = xB, \quad \tilde{A}_x = \tilde{A}_z = 0.$$

6.7. Для линейного осциллятора с массой m и частотой ω_0 введем в рассмотрение операторы \hat{a} и \hat{a}^+ , определяемые равенствами:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right), \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right),$$

где \hat{x} и \hat{p} – операторы координаты и импульса.

- а) Вычислить коммутатор операторов \hat{a} и \hat{a}^+ .
- б) Построить систему собственных векторов и найти спектр собственных значений оператора $\hat{a}^+ \hat{a}$, пользуясь коммутатором операторов \hat{a} , \hat{a}^+ .
- в) Выразить гамильтониан осциллятора через оператор $\hat{a}^+ \hat{a}$.

6.8. Пусть $|n\rangle$ – нормированные стационарные состояния линейного осциллятора с массой m и собственной частотой ω_0 . Найти:

- а) Матричные элементы $\langle n' | \hat{x} | n \rangle$ оператора координаты осциллятора.
- б) Среднее значение квадрата координаты в стационарном состоянии.

6.9. В начальный момент времени ($t=0$) состояние гармонического осциллятора задано в виде следующей суперпозиции всех его стационарных состояний $|n\rangle$:

$$|\alpha\rangle|_{t=0} = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle,$$

где α – произвольное комплексное число. Принято называть $|\alpha\rangle$ когерентным состоянием.

а) Определить зависимость от времени среднего значения координаты осциллятора в когерентном состоянии.

б) Найти распределение вероятности W_n для числа n квантов в когерентном состоянии осциллятора, вычислить средние значения n и n^2 .

6.10. Рассматривается квантовая система, имеющая только два стационарных состояния: $|0\rangle$ – основное состояние с энергией $\varepsilon_0 = 0$, $|1\rangle$ – возбужденное состояние с энергией $\varepsilon_1 > \varepsilon_0$. Эти состояния образуют полный ортонормированный базис. Пусть \hat{c} – «понижающий» оператор, характеризующийся равенствами:

$$\hat{c}|1\rangle = |0\rangle, \quad \hat{c}|0\rangle = 0.$$

В рассматриваемом случае такой оператор принято называть фермионным оператором уничтожения.

а) Установить результат действия оператора \hat{c}^+ на указанные базисные состояния $|0\rangle, |1\rangle$.

б) Проверить, что операторы \hat{c}, \hat{c}^+ удовлетворяют равенствам

$$\{\hat{c}, \hat{c}^+\} = 1, \quad \{\hat{c}, \hat{c}\} = \{\hat{c}^+, \hat{c}^+\} = 0,$$

где фигурными скобками обозначен *антикоммутатор* операторов, определяемый формулой: $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$.

в) Показать, что гамильтониан рассматриваемой системы может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \varepsilon_1 \hat{c}^+ \hat{c}.$$

Решения

6.1. а) Как известно, потенциальная энергия обычного линейного осциллятора равна

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \equiv \frac{1}{2} K x^2, \quad (1)$$

где m – масса частицы, ω_0 – собственная частота колебаний. При этом уравнение Шредингера

$$\hat{H} \psi(x) = \varepsilon \psi(x) \quad (2)$$

с гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_{осц} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \quad (3)$$

дает спектр энергетических уровней

$$\varepsilon_n = \hbar \omega_0 (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4)$$

и волновые функции стационарных состояний осциллятора:

$$\psi_n^{osc}(x) \equiv \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{x^2}{2} \frac{m\omega_0}{\hbar} \right) H_n\left(x \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} \right), \quad (5)$$

где $H_n(\xi)$ – полиномы Эрмита ($H_0(\xi) = 1$, $H_1(\xi) = 2\xi$, $H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$, ...).
Функции (5) вещественны, нормированы на единицу и взаимно ортогональны:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^{osc}(x) \psi_{n'}^{osc}(x) = \delta_{nn'}. \quad (6)$$

При наложении на заряженный осциллятор электрического поля \mathbf{E} , направленного вдоль оси x , к потенциальной энергии (1) добавляется вклад $-qEx$, соответствующий наличию внешней силы $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$. Гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 - qEx. \quad (7)$$

Поскольку при добавлении линейного по x члена характер *квадратичной* зависимости потенциала от x сохраняется, уравнение Шредингера с гамильтонианом (7) должно заменой переменной $x = \tilde{x} + x_0$ сводиться к уравнению Шредингера для обычного линейного осциллятора. Произведя в (7) указанную замену и выбрав постоянную x_0 так, чтобы слагаемое, линейное относительно новой переменной \tilde{x} , исчезло, имеем:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \tilde{x}^2 - \frac{q^2 E^2}{2m\omega_0^2}, \quad (8)$$

где

$$\tilde{x} = x - \frac{qE}{m\omega_0^2}. \quad (9)$$

Сравнивая (8) с (3), заключаем, что искомыми собственными функциями для (7) или (8) являются

$$\psi_n(x) = \psi_n^{osc}(\tilde{x}) = \psi_n^{osc}\left(x - \frac{qE}{m\omega_0^2}\right), \quad (10)$$

а энергетический спектр имеет вид:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 E^2}{2m\omega_0^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (11)$$

Отметим, что в классической механике в задаче о линейном осцилляторе включение постоянной силы F также приводит лишь к смещению положения равновесия осциллятора на величину $x_0 = F / m \omega_0^2$ и к сдвигу минимума потенциальной энергии на $\Delta \varepsilon = -F^2 / 2 m \omega_0^2$.

б) Формула (11) показывает, что вызванный электрическим полем сдвиг энергетических уровней квантового осциллятора ε_n характеризуется не зависящей от n величиной

$$\Delta \varepsilon = - \frac{q^2 E^2}{2 m \omega_0^2} . \quad (12)$$

Таким образом, поляризуемость β , определяемая из формулы $\Delta \varepsilon = -\beta E^2 / 2$, для всех стационарных состояний осциллятора одинакова и равна $q^2 / m \omega_0^2$. В данном случае выражение для поляризуемости не содержит постоянной Планка и, следовательно, имеет классический характер.

Определив оператор электрического дипольного момента (точнее говоря, оператор его проекции на ось x) формулой $\hat{d} = q \hat{x}$, для среднего значения этого оператора будем иметь:

$$\langle d \rangle = q \langle x \rangle = q \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi_n(x)|^2 . \quad (13)$$

Перейдем к интегрированию по переменной $\tilde{x} = x - x_0$, где $x_0 = qE / m \omega_0^2$:

$$\langle d \rangle = q \langle x \rangle = q \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{x} \tilde{x} |\psi_n^{ocu}(\tilde{x})|^2 + q x_0 \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{x} |\psi_n^{ocu}(\tilde{x})|^2 . \quad (14)$$

Первое слагаемое в правой части (14) обращается в нуль, поскольку, как можно видеть из (5), функции ψ_n^{ocu} обладают определенной четностью (равной $(-1)^n$) и, следовательно, подынтегральное выражение нечетно относительно замены $\tilde{x} \rightarrow -\tilde{x}$. Второе слагаемое в (14) с учетом нормировки функций ψ_n^{ocu} на единицу равно $q x_0$. Таким образом,

$$\langle d \rangle = q x_0 = \frac{q^2}{m \omega_0^2} E . \quad (15)$$

Видно, что формула $\langle d \rangle = \beta E$ дает для поляризуемости β уже известный нам результат:

$$\beta = q^2 / m \omega_0^2 . \quad (16)$$

6.2. а) В данной задаче гамильтониан частицы можно записать в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 . \quad (1)$$

Здесь каждый из операторов

$$\hat{H}_k = \frac{\hat{p}_k^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_k^2 x_k^2, \quad \omega_k \equiv \sqrt{\frac{K_k}{m}}, \quad (2)$$

представляет собой гамильтониан линейного осциллятора и связан только с одной из трех координатных переменных (x_k означает x , y или z соответственно значениям $k = 1, 2, 3$). Следовательно, пользуясь методом разделения переменных, мы найдем, что собственные функции гамильтониана (1) равны произведению волновых функций линейных осцилляторов:

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \Psi_{n_1}^{osc}(x) \Psi_{n_2}^{osc}(y) \Psi_{n_3}^{osc}(z), \quad (3)$$

где функции $\Psi_{n_k}^{osc}(x_k)$ определяются формулой (5) в задаче 6.1. Функции (3) обладают четностью $(-1)^{n_1+n_2+n_3}$. Они образуют ортонормированную систему:

$$\int d^3 \mathbf{r} \Psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}) \Psi_{n'_1 n'_2 n'_3}(\mathbf{r}) = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \delta_{n_3 n'_3}. \quad (4)$$

Стационарные состояния нумеруются совокупностью квантовых чисел n_1, n_2, n_3 , независимо друг от друга принимающих значения $0, 1, 2, \dots$. Энергия стационарного состояния равна сумме трех вкладов, каждый из которых отвечает одномерному колебанию осциллятора вдоль x , y или z с соответствующими частотами ω_k :

$$\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega_1 (n_1 + 1/2) + \hbar \omega_2 (n_2 + 1/2) + \hbar \omega_3 (n_3 + 1/2). \quad (5)$$

б) В случае с $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega_0$ энергетические уровни

$$\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega_0 (n_1 + n_2 + 1) + \hbar \omega_3 (n_3 + 1/2) \quad (6)$$

со всевозможными значениями n_1 и n_2 , при которых постоянна сумма $n_1 + n_2$, оказываются вырожденными. При заданном $N \equiv n_1 + n_2$ можем полагать n_1 равным $0, \dots, N$ (всего $N + 1$ значений), а n_2 будет определяться однозначно – как $N - n_1$. Таким образом, энергетический спектр (6) характеризуется $(N + 1)$ -кратным вырождением и может быть записан в виде:

$$\varepsilon_{N, n_3} = \hbar \omega_0 (N + 1) + \hbar \omega_3 (n_3 + 1/2), \quad N, n_3 = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

в) Случаю с $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 \equiv \omega_0$ отвечает «сферический» осциллятор (частица в сферически симметричном поле $U(\mathbf{r}) = m\omega_0^2 r^2 / 2$). Формула (5) принимает вид

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0(n + 3/2), \quad (8)$$

где $n = n_1 + n_2 + n_3$. При заданном n можем полагать n_1 равным $0, \dots, n$, число n_2 будет принимать значения $0, \dots, n - n_1$ (всего $n - n_1 + 1$ значений), а число n_3 определится однозначно – как $n - n_1 - n_2$. Следовательно, кратность вырождения уровней энергии (8) равна

$$\sum_{n_1=0}^n (n - n_1 + 1) = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2). \quad (9)$$

6.3. По отношению к координатным переменным потенциал

$$U(x, y, z) = \frac{m\omega_0^2}{2} \left(x^2 + \frac{y^2 + z^2}{2} + yz \right) \quad (1)$$

представляет собой квадратичную форму, но не имеет «осцилляторного» вида из-за наличия члена yz . Сделаем замену переменных, в результате которой U будет содержать одни лишь квадраты новых координатных переменных. Целесообразно применить ортогональное преобразование координат (отвечающее некоторому повороту координатной системы); такое преобразование не изменяет форму оператора кинетической энергии в уравнении Шредингера.

В рассматриваемом примере требуемое преобразование координат $x, y, z \rightarrow X, Y, Z$ легко подбирается. Действительно, так как $(y^2 + z^2)/2 + yz = (y + z)^2 / 2$, мы заключаем, что

$$X = x, \quad Y = \frac{y + z}{\sqrt{2}}, \quad Z = \frac{-y + z}{\sqrt{2}}. \quad (2)$$

Переменные (2) – это координаты в декартовой системе, образующейся при повороте первоначальных декартовых осей на угол $\pi/4$ в плоскости y, z . В новой системе координат потенциал (1) принимает вид:

$$U(X, Y, Z) = \frac{1}{2} m\omega_0^2 X^2 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 Y^2. \quad (3)$$

Напомним читателю, как в случае квадратичного потенциала общего вида получать подобные результаты систематическим путем. Скалярная квадратичная форма $U(x_1, x_2, x_3)$ представляется в виде

$$U(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 K_{ij} x_i x_j, \quad (4)$$

где $K_{ij} = K_{ji}$ – вещественные коэффициенты, образующие симметричный тензор второго ранга, x_1, x_2, x_3 – координаты x, y, z . Приведение формы (4) к сумме квадратов или, иными словами, приведение тензора K_{ij} к диагональному виду связано с задачей отыскания собственных значений K и собственных векторов C_j матрицы K_{ij} :

$$\sum_j (K_{ij} - K \delta_{ij}) C_j = 0. \quad (5)$$

Система однородных уравнений (5) относительно величин C_j , представляющих собой компоненты ортов новой системы координат X_1, X_2, X_3 , имеет нетривиальные решения при условии:

$$\det(K_{ij} - K \delta_{ij}) = 0. \quad (6)$$

В системе координат X_1, X_2, X_3 тензор K_{ij} примет диагональный вид, причем его диагональными элементами будут корни K_1, K_2, K_3 уравнения (6). Таким образом в новой системе координат

$$U(X_1, X_2, X_3) = \frac{1}{2} (K_1 X_1^2 + K_2 X_2^2 + K_3 X_3^2). \quad (7)$$

Решениями системы уравнений (5) определяется положение новых координатных осей относительно первоначальных осей и тем самым устанавливаются формулы перехода от x_1, x_2, x_3 к X_1, X_2, X_3 :

$$X_n = \sum_j C_j^{(n)} x_j, \quad (8)$$

где $C_j^{(n)}$ – собственный вектор, принадлежащий собственному значению K_n , нормированный условием

$$\left(C_1^{(n)}\right)^2 + \left(C_2^{(n)}\right)^2 + \left(C_3^{(n)}\right)^2 = 1. \quad (9)$$

Для потенциала (1) указанный метод дает $K_1 = K_2 = m\omega_0^2$, $K_3 = 0$, и ведет к результатам (2), (3).

Потенциал (3) соответствует двумерному осцилляторному движению в направлениях, перпендикулярных оси z , и свободному движению частицы

вдоль оси z . Применив к уравнению Шредингера с потенциалом (3) процедуру разделения переменных, получим волновые функции стационарных состояний частицы в виде

$$\Psi_{n_1 n_2 p_z}(X, Y, Z) = \Psi_{n_1}^{ocu}(X) \Psi_{n_2}^{ocu}(Y) \Psi_{p_z}(Z), \quad (10)$$

где функции Ψ_n^{ocu} даются формулой (5) задачи 6.1, Ψ_{p_z} – плоская волна:

$$\Psi_{p_z}(Z) = C e^{ip_z Z / \hbar}. \quad (11)$$

Энергия частицы в стационарном состоянии (10) складывается из дискретных уровней энергии двумерного осцилляторного движения и энергии одномерного свободного движения с импульсом $-\infty < p_z < \infty$:

$$\varepsilon_{n_1 n_2 p_z} = \hbar \omega_0 (n_1 + n_2 + 1) + p_z^2 / 2m. \quad (12)$$

6.4. Для того чтобы найти распределение вероятности значений импульса,

$$dW(p) = \frac{|a_n(p)|^2}{2\pi\hbar} dp, \quad (1)$$

в стационарных состояниях $\Psi_n(x)$ линейного осциллятора,

$$\Psi_n(x) = \Psi_n^{ocu}(x) = C_n e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{b}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{b}\right), \quad (2)$$

где

$$C_n = \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}, \quad (3)$$

вычислим компоненты Фурье функции $\Psi_n(x)$, то есть – коэффициенты $a_n(p)$ разложения волновой функции (2) по собственным функциям импульса:

$$a_n(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \Psi_n(x). \quad (4)$$

Обозначив

$$x/b = \xi, \quad pb/\hbar = q, \quad (5)$$

имеем:

$$a_n = C_n b \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2/2} e^{-iq\xi} H_n(\xi). \quad (6)$$

Для вычисления интеграла (6) можно воспользоваться, например, следующим тождеством, применимым к произведению экспоненциальной функции $e^{-iq\xi}$ и произвольного полинома $A_0 + A_1\xi + \dots + A_n\xi^n$:

$$e^{-iq\xi}(A_0 + A_1\xi + \dots + A_n\xi^n) = (A_0 + A_1i\frac{d}{dq} + \dots + A_n\left(i\frac{d}{dq}\right)^n) e^{-iq\xi} .$$

Меняя очередность интегрирования по ξ и дифференцирований по q , и, кроме того, пользуясь формулой (3) из задачи 4.1, получим:

$$a_n = C_n b \hat{H}_n\left(i\frac{d}{dq}\right) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2/2} e^{-iq\xi} = C_n b \sqrt{2\pi} \hat{H}_n\left(i\frac{d}{dq}\right) e^{-q^2/2} . \quad (7)$$

Непосредственное вычисление с учетом явного вида полиномов Эрмита H_n дает:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0\left(i\frac{d}{dq}\right) e^{-q^2/2} &= e^{-q^2/2} = e^{-q^2/2} H_0(q) , \\ \hat{H}_1\left(i\frac{d}{dq}\right) e^{-q^2/2} &= -2iq e^{-q^2/2} = -i e^{-q^2/2} H_1(q) , \\ \hat{H}_2\left(i\frac{d}{dq}\right) e^{-q^2/2} &= (2-4q^2) e^{-q^2/2} = -e^{-q^2/2} H_2(q) , \end{aligned}$$

и так далее. Мы приходим к заключению, что зависимость от p (или, что то же самое, от $q = pb/\hbar$) компонент Фурье (4) в случае функций $\psi_n^{ocu}(x)$ аналогична по функциональной форме зависимости ψ_n^{ocu} от x :

$$a_n = (-i)^n \sqrt{2\pi} b C_n e^{-q^2/2} H_n(q) . \quad (8)$$

Подставляя (8) в (1) и учитывая (3), получаем искомое распределение вероятности:

$$dW(p) = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi m \omega_0 \hbar}} e^{-p^2/m\omega_0\hbar} H_n^2\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega_0\hbar}}\right) dp . \quad (9)$$

6.5. Гамильтониан бесспиновой частицы с электрическим зарядом q в присутствии векторного потенциала \mathbf{A} имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 , \quad (1)$$

где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Раскрыв скобки с учетом заданного в условии задачи явного вида компонент векторного потенциала,

$$A_x = -yB, \quad A_y = A_z = 0, \quad (2)$$

получим

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} - \frac{q}{2mc} (\hat{p}_x A_x + A_x \hat{p}_x) + \frac{q^2}{2mc^2} A_x^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} = \\ &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{qB}{mc} y \hat{p}_x + \frac{m}{2} \left(\frac{qB}{mc} \right)^2 y^2. \end{aligned} \quad (3)$$

Это выражение коммутативно с операторами \hat{p}_x и \hat{p}_z , так как оно не содержит координат x и z . Следовательно, в данном случае волновые функции стационарных состояний целесообразно искать как такие функции, которые являются собственными одновременно для \hat{p}_x , \hat{p}_z и \hat{H} :

$$\psi(x, y, z) = C e^{ip_x x/\hbar + ip_z z/\hbar} \Phi(y). \quad (4)$$

Здесь $\Phi(y)$ – неизвестная функция.

После подстановки (4) в уравнение Шредингера

$$\hat{H} \psi = \varepsilon \psi \quad (5)$$

с гамильтонианом (3) операторные члены в \hat{H} , содержащие \hat{p}_x и \hat{p}_z , заменяются соответствующими числовыми величинами. С помощью такой замены и применения обозначений

$$\omega_0 = \frac{qB}{mc}, \quad (6)$$

$$y_0 = -\frac{cp_x}{Bq}, \quad (7)$$

$$E = \varepsilon - \frac{p_z^2}{2m} \quad (8)$$

уравнение Шредингера (5) приводится к уравнению для линейного осциллятора, совершающего колебания вдоль оси y относительно начальной точки $y = y_0$:

$$\left(\frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (y - y_0)^2 \right) \Phi(y) = E \Phi(y). \quad (9)$$

Следовательно, допустимые значения энергии (8) и отвечающие им функции $\Phi(y)$ имеют следующий вид:

$$E_n = \hbar\omega_0 (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (10)$$

$$\Phi_n(y) = \psi_n^{ocu}(y - y_0). \quad (11)$$

Таким образом, те решения нашей исходной задачи, которые допускают представление в форме (4), найдены:

$$\Psi_{p_x, p_z, n}(x, y, z) = C e^{ip_x x/\hbar + ip_z z/\hbar} \psi_n^{ocu}(y + cp_x/qB). \quad (12)$$

Квантовыми числами найденных стационарных состояний служат величины p_x , p_z с непрерывным спектром значений и число n , принимающее только дискретные значения $0, 1, 2, \dots$. Энергия стационарного состояния,

$$\varepsilon_{p_z, n} = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_0 (n + 1/2), \quad (13)$$

имеет вид суммы энергии свободного движения частицы вдоль оси z с импульсом p_z и дискретных энергетических уровней (10), называемых *уровнями Ландау*.

Уровни (13) не зависят от величины p_x и, следовательно, имеют бесконечную кратность вырождения. Это означает, что решением уравнения Шредингера, принадлежащим определенной энергии (13), является не только функция (12), но и любая линейная комбинация таких функций со всевозможными значениями p_x . Поскольку спектр p_x непрерывен, указанная линейная комбинация в общем случае запишется в виде интеграла по p_x

$$\Psi_{p_z, n}(\mathbf{r}) = e^{ip_z z/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x C(p_x) e^{ip_x x/\hbar} \psi_n^{ocu}(y + cp_x/qB), \quad (14)$$

где $C(p_x)$ – произвольная функция.

Отметим, что векторным потенциалом (1) описывается магнитное поле $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ с компонентами

$$B_x = B_y = 0, \quad B_z = B. \quad (15)$$

В классической механике движение заряженной частицы в однородном магнитном поле, параллельном оси z , представляется как результат наложения равномерного прямолинейного движения с импульсом p_z вдоль оси z и вращения с частотой $\omega_0 = qB/mc$ в плоскости x, y по окружности радиуса

$\rho = cp_{\perp} / qB$, где $p_{\perp} = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ – поперечная относительно направления \mathbf{B} составляющая импульса частицы; ρ называют радиусом *ларморовской орбиты*. Как видно из (13), в квантовой механике классическому вращению частицы по ларморовским орбитам можно сопоставить уровни Ландау – набор дискретных значений энергии, характерный для гармонического осциллятора с собственной частотой $\omega_0 = qB / mc$.

6.6. Прежде всего выпишем волновую функцию стационарного состояния для частицы в присутствии векторного потенциала

$$\tilde{A}_y = xB, \quad \tilde{A}_x = \tilde{A}_z = 0. \quad (1)$$

Это легко сделать, заметив, что (1) можно рассматривать как компоненты поля

$$A_x = -yB, \quad A_y = A_z = 0 \quad (2)$$

в новой системе координат, получающейся в результате поворота исходных осей на угол $\pi/2$ вокруг оси z . Не решая заново уравнение Шредингера, достаточно произвести замену $x \rightarrow -y$, $y \rightarrow x$ (а также $p_x \rightarrow -p_y$) в выражении (12) задачи 6.5. Опустив для упрощения записи нормировочный множитель C , получаем:

$$\tilde{\Psi}_{p_y, p_z, n}(x, y, z) = e^{ip_z z / \hbar} e^{ip_y y / \hbar} \Psi_n^{ocu}(x - cp_y / qB), \quad (3)$$

Теперь будем применять формулы калибровочного преобразования, которые, как известно, имеют вид

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{A}} - \nabla f, \quad \varphi = \tilde{\varphi} + \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (4)$$

$$\psi = e^{-ifq / \hbar c} \tilde{\psi}. \quad (5)$$

Сравнив (1) и (2), находим ∇f :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = yB, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = xB, \quad \frac{\partial f}{\partial z} = 0. \quad (6)$$

Следовательно, калибровочную функцию f можно выбрать в форме:

$$f(\mathbf{r}) = Bxy, \quad (7)$$

и при этом, согласно (5), волновая функция вида

$$\Psi_{p_y, p_z, n}(\mathbf{r}) = e^{-i \frac{qB}{\hbar c} xy + i(p_z z + p_y y)/\hbar} \Psi_n^{ocu}(x - cp_y / qB) \quad (8)$$

должна оказаться одним из решений уравнения Шредингера с векторным потенциалом (2).

Допустимые выражения для решений указанного уравнения Шредингера приведены в формулах (12) и (14) задачи 6.5. Таким образом, нам необходимо убедиться в том, что последняя из упомянутых формул включает в качестве частного случая и найденную здесь функцию (8).

Пользуясь представлением $\Psi_n^{ocu}(x)$ в виде разложения в интеграл Фурье по плоским волнам,

$$\Psi_n^{ocu}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} a_n(p_x) e^{ip_x x / \hbar}, \quad (9)$$

и учитывая в (8) вытекающее из (9) соотношение

$$\Psi_n^{ocu}(x - cp_y / qB) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} a_n(p_x) e^{i p_x x / \hbar - i \frac{c p_x p_y}{qB\hbar}}, \quad (10)$$

имеем:

$$\Psi_{p_y, p_z, n}(\mathbf{r}) = e^{i \frac{p_z z}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} a_n(p_x) e^{i \frac{p_x x + p_y y}{\hbar} - i \frac{c p_x p_y}{qB\hbar} - i \frac{qB}{\hbar c} xy}. \quad (11)$$

Замена (сдвиг) переменной интегрирования $p_x \rightarrow p_x + qBy/c$ приводит к взаимному сокращению некоторых экспоненциальных множителей под знаком интеграла в (11), и мы получаем:

$$\Psi_{p_y, p_z, n}(\mathbf{r}) = e^{i p_z z / \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} a_n(p_x + qBy/c) e^{i p_x x / \hbar - i \frac{c p_x p_y}{qB\hbar}}. \quad (12)$$

По ходу решения задачи 6.4 было показано, что функции $a_n(q)$ и $\Psi_n^{ocu}(\xi)$ аналогичны друг другу. Другими словами, в силу соотношения (8) задачи 6.4 справедливо равенство

$$\begin{aligned} a_n(p_x + qBy/c) &= (-i)^n \sqrt{2\pi} b \frac{(\pi b^2)^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\left(\frac{cp_x}{qB} + y\right)^2 / 2b^2} H_n\left(\frac{cp_x / qB + y}{b}\right) = \\ &= (-i)^n \sqrt{2\pi} b \Psi_n^{ocu}(y + cp_x / qB), \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$b = \sqrt{\hbar / m\omega_0}, \quad \omega_0 = qB / mc.$$

Введем в рассмотрение зависящую от p_x и p_y величину $C(p_x, p_y)$:

$$C(p_x, p_y) = (-i)^n \frac{b}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-icp_x p_y / qB\hbar}. \quad (14)$$

Учитывая в (12) равенства (13) и (14), мы находим, таким образом, что рассматриваемая здесь волновая функция (8) и в самом деле допускает представление в виде

$$\Psi_{p_y, p_z, n}(\mathbf{r}) = e^{ip_z z / \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x C(p_x, p_y) e^{ip_x x / \hbar} \Psi_n^{ocu}(y + cp_x / qB), \quad (15)$$

соответствующее формуле (14) задачи 6.5. Эта волновая функция, следовательно, описывает одно из стационарных состояний принадлежащих вырожденному с бесконечной кратностью уровню

$$\varepsilon_{p_z, n} = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{qB\hbar}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (16)$$

Для более полного анализа следует начинать не с частного решения (3), а с общего решения $\tilde{\Psi}_{p_z, n}(\mathbf{r})$, получаемого умножением (3) на произвольный коэффициент $N(p_y)$ с последующим интегрированием по p_y :

$$\tilde{\Psi}_{p_z, n}(\mathbf{r}) = e^{ip_z z / \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y N(p_y) e^{ip_y y / \hbar} \Psi_n^{ocu}(x - cp_y / qB). \quad (17)$$

Произведя затем калибровочное преобразование (5) и выполнив применительно к построенной так волновой функции $\Psi_{p_z, n}(\mathbf{r})$ те же действия, что и выше (на этот раз – под знаком интеграла по p_y), мы снова придем к формуле (14) задачи 6.5. В такой формуле коэффициент $C(p_x)$ будет иметь вид функции $C(p_x, p_y) N(p_y)$, проинтегрированной по p_y .

Обсудим основные черты плотности вероятности $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ в рассматриваемых стационарных состояниях частицы. Интерес представляет зависимость этой величины от координат x и y , оси которых перпендикулярны направлению магнитного поля \mathbf{B} .

Состоянию $\Psi_{p_x, p_z, n}(\mathbf{r})$ (формула (12) задачи 6.5) отвечает однородное распределение «электронной плотности» вдоль оси x и характерное для

линейного осциллятора распределение вида $|\psi_n^{ocy}(y-y_0)|^2$ вдоль y . При $y \rightarrow \pm\infty$ вероятность обнаружения частицы резко убывает; это убывание характеризуется пространственным масштабом

$$b = \sqrt{\hbar/m\omega_0} = \sqrt{\hbar c/qB} . \quad (18)$$

Величину $\sqrt{\hbar c/qB}$ называют *магнитной длиной*.

Если бы волновая функция $\psi_{p_x, p_z, n}(\mathbf{r})$ являлась единственным решением, то подобная выделенность одной из двух координат x и y , конечно, вызывала бы удивление. В действительности каждому уровню энергии (16) соответствует бесконечное множество волновых функций (формула (14) задачи 6.5), среди которых, как мы уже убедились, имеется и решение (8). Это решение восстанавливает «равноправие» осей x и y , поскольку оно дает однородное распределение вероятности обнаружения частицы вдоль y и характерное для осциллятора распределение вида $|\psi_n^{ocy}(x-x_0)|^2$ вдоль x . Убывание этой вероятности вдоль x характеризуется магнитной длиной (18). Такая же картина соответствует решению (3) уравнения Шредингера с векторным потенциалом (1).

6.7. а) Подставив в правую часть равенства $[\hat{a}, \hat{a}^+] \equiv \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}$ указанные в условии задачи операторные выражения

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right), \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right), \quad (1)$$

имеем:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = -\frac{i}{\hbar}(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] .$$

С учетом известного коммутационного соотношения для операторов координаты и импульса,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar , \quad (2)$$

находим коммутатор операторов \hat{a} и \hat{a}^+ :

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 . \quad (3)$$

б) Оператор $\hat{a}^+\hat{a}$ эрмитов; он должен иметь вещественные собственные значения (мы их временно обозначим как λ) и взаимно ортогональные

собственные векторы $|\lambda\rangle$. Предположим, что для какого-либо собственного значения λ существует нормированный собственный вектор $|\lambda\rangle$:

$$\hat{a}^+ \hat{a} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle, \quad (4)$$

$$\langle \lambda | \lambda \rangle = 1. \quad (5)$$

Рассмотрим результат действия оператора $\hat{a}^+ \hat{a}$ на вектор $\hat{a} |\lambda\rangle$, учитывая равенства (3) и (4):

$$\hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} |\lambda\rangle = (\hat{a} \hat{a}^+ - 1) \hat{a} |\lambda\rangle = \hat{a} (\hat{a}^+ \hat{a} |\lambda\rangle) - \hat{a} |\lambda\rangle = (\lambda - 1) \hat{a} |\lambda\rangle. \quad (6)$$

Видно, что $\hat{a} |\lambda\rangle$ – также собственный вектор оператора $\hat{a}^+ \hat{a}$ (если только $\hat{a} |\lambda\rangle \neq 0$), причем отвечающее этому вектору собственное значение на единицу меньше первоначального: $\lambda - 1$. Другими словами, \hat{a} – «понижающий» оператор.

Скалярно умножив обе стороны равенства (4) на $|\lambda\rangle$ и приняв во внимание (5), получим:

$$\langle \lambda | \hat{a}^+ \hat{a} |\lambda\rangle = \lambda,$$

или

$$\langle \hat{a} \lambda | \hat{a} \lambda \rangle = \lambda. \quad (7)$$

Следовательно, если $\hat{a} |\lambda\rangle \neq 0$, то $\lambda > 0$ (поскольку левая сторона в (7) представляет собой квадрат нормы вектора), и вектор $\hat{a} |\lambda\rangle$ можно нормировать на единицу: нормированный собственный вектор, принадлежащий собственному значению $\lambda - 1$, есть

$$|\lambda - 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \hat{a} |\lambda\rangle. \quad (8)$$

Последовательно действуя m раз оператором \hat{a} на определяемые формулой (8) нормированные собственные векторы, получаем ряд собственных векторов, отвечающий убывающей последовательности собственных значений $\lambda, \lambda - 1, \dots, \lambda - m$. Однако данный процесс построения собственных векторов заведомо не может продолжаться до бесконечности. В самом деле, на каждом шаге мы будем иметь равенство, аналогичное (7),

$$\langle \hat{a}(\lambda - m) | \hat{a}(\lambda - m) \rangle = \lambda - m, \quad (9)$$

и, следовательно, при $\hat{a} |\lambda - m\rangle \neq 0$ должно выполняться неравенство $\lambda - m > 0$,

но, с другой стороны, число повторений указанной выше процедуры m можно взять сколь угодно большим. Отсюда мы заключаем, что λ принимает только *целочисленные значения*:

$$\lambda = n, \quad n = 0, 1, 2, \dots . \quad (10)$$

Действительно, лишь в этом случае на некотором шаге ($m = n$) мы придем к нулевому собственному значению, $\lambda - n = 0$, причем, как видно из (9), собственный вектор $|0\rangle$, отвечающий нулевому собственному значению, будет удовлетворять равенству:

$$\hat{a}|0\rangle = 0. \quad (11)$$

Повторное действие оператора \hat{a} на обе стороны этого равенства уже не дает новых собственных векторов, то есть последовательность (8), как и должно быть, обрывается.

Рассмотрим результат действия оператора $\hat{a}^+\hat{a}$ на вектор $\hat{a}^+|\lambda\rangle$, снова принимая во внимание соотношения (3) и (4):

$$\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+|\lambda\rangle = \hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + 1)|\lambda\rangle = (\lambda + 1)\hat{a}^+|\lambda\rangle .$$

Видно, что $\hat{a}^+|\lambda\rangle$ – собственный вектор оператора $\hat{a}^+\hat{a}$, принадлежащий собственному значению $\lambda + 1$, то есть \hat{a}^+ – «повышающий» оператор. Найдем квадрат нормы этого вектора, причем, учитывая (10), будем теперь обозначать нормированные собственные векторы $|\lambda\rangle$ как $|n\rangle$; имеем:

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

Следовательно,

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle . \quad (12)$$

Этой формулой характеризуется действие оператора \hat{a}^+ на нормированные собственные векторы оператора $\hat{a}^+\hat{a}$. Аналогичная формула для оператора \hat{a} следует из (8):

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle . \quad (13)$$

Итак, мы нашли спектр (10) оператора $\hat{a}^+\hat{a}$ и, кроме того, убедились, что начав с нормированного основного состояния $|0\rangle$, удовлетворяющего уравнению (11), можно с помощью формулы (12) получить все остальные собственные для $\hat{a}^+\hat{a}$ нормированные векторы $|n\rangle$:

$$|1\rangle = \hat{a}^+ |0\rangle, \quad |2\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^2}{\sqrt{2!}} |0\rangle, \quad \dots, \quad |n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad \dots \quad (14)$$

Поскольку спектр (10) не вырожден (каждому значению n принадлежит только один собственный вектор), состояния (14) взаимно ортогональны:

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'} . \quad (15)$$

Покажем, как найти волновые функции $\psi_n(x)$ состояний $|n\rangle$ в координатном представлении.

Учитывая, что в координатном представлении $\hat{x} = x$, $\hat{p} = -i\hbar d/dx$, и переходя к безразмерной координатной переменной

$$\xi = x \sqrt{m\omega_0 / \hbar} , \quad (16)$$

запишем операторы (1) в виде

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) . \quad (17)$$

Равенство (11) приобретает смысл уравнения для волновой функции $\psi_0(x)$ состояния $|0\rangle$:

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

то есть

$$\frac{d\psi_0(\xi)}{d\xi} + \xi \psi_0(\xi) = 0 . \quad (18)$$

Непосредственной проверкой легко убедиться, что решением этого дифференциального уравнения первого порядка является функция

$$\psi_0(x) = C e^{-\xi^2/2} , \quad (19)$$

где C – постоянная. Чтобы определить C , вычислим нормировочный интеграл:

$$\langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0|^2 = |C|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2/2} = |C|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \sqrt{\pi} .$$

Полагая $\langle 0|0\rangle = 1$, находим:

$$C = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/4} . \quad (20)$$

Теперь воспользуемся формулой, вытекающей из (12):

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n}} |n-1\rangle, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (21)$$

которая в координатном представлении означает, что

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \psi_{n-1}(\xi). \quad (22)$$

Рекуррентное соотношение (22) позволяет шаг за шагом определить волновые функции $\psi_n(x)$, начав с уже известной функции $\psi_0(x)$. Можно получить и явное выражение для $\psi_n(x)$. С этой целью заметим, что в силу тождества, справедливого для произвольной функции $f(\xi)$,

$$\left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) f(\xi) = (-1) e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} \left(e^{-\xi^2/2} f(\xi) \right), \quad (23)$$

соотношение (22) принимает вид:

$$\psi_n(\xi) = \frac{(-1)}{\sqrt{2n}} e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} \left(e^{-\xi^2/2} \psi_{n-1}(\xi) \right).$$

Применим в правой стороне этого соотношения аналогичное равенство для $\psi_{n-1}(\xi)$,

$$\psi_{n-1}(\xi) = \frac{(-1)}{\sqrt{2(n-1)}} e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} \left(e^{-\xi^2/2} \psi_{n-2}(\xi) \right).$$

Повторим подобную процедуру еще $n-2$ раз. На последнем шаге в правой стороне появится функция (19), и мы придем к формуле:

$$\psi_n(\xi) = C \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{\xi^2/2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}).$$

С помощью полиномов Эрмита $H_n(\xi)$,

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}), \quad (24)$$

окончательное выражение для волновых функций состояний $|n\rangle$ запишется в виде

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi). \quad (25)$$

Функции (25) совпадают с волновыми функциями стационарных состояний линейного осциллятора (см. (5) в задаче 6.1).

в) Обращая равенства (1), выразим операторы \hat{x} , \hat{p} через \hat{a} , \hat{a}^+ :

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad (26)$$

$$\hat{p} = -i \sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+). \quad (27)$$

Подстановка (26) и (27) в гамильтониан линейного осциллятора

$$\hat{H}_{осц} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \hat{x}^2 \quad (28)$$

приводит его к виду

$$\hat{H}_{осц} = \frac{\hbar\omega_0}{2} (\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}). \quad (29)$$

Поскольку из коммутационного соотношения (3) следует равенство $\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a} + 1$, целесообразно гамильтониан (29) выразить полностью через рассматривавшийся выше оператор $\hat{a}^+\hat{a}$, для которого спектром собственных значений служат числа $n = 0, 1, 2, \dots$ (для оператора $\hat{a}\hat{a}^+$ собственные значения равны $n + 1$):

$$\hat{H}_{осц} = \hbar\omega_0 \hat{a}^+\hat{a} + \frac{\hbar\omega_0}{2}. \quad (30)$$

Гамильтониан является одним из основных средств описания квантовой системы. Результат (30) примечателен тем, что здесь описание системы не включает таких величин, как масса и координата осциллятора (в гамильтониан (30), в отличие от (28), входит только собственная частота системы). Это позволяет применять гамильтонианы вида (30) для «квантования» систем, отличных от одиночной частицы, движущейся в поле упругих сил. По существу, любая система, в которой с классической точки зрения возможно возбуждение какого-либо гармонического колебательного процесса (моды с определенной частотой ω_0) в квантовой теории рассматривается как осциллятор с гамильтонианом (30). Энергия системы, отсчитываемая от уровня

основного состояния $\varepsilon_0 = \hbar\omega_0 / 2$, дается формулой:

$$\varepsilon_n - \varepsilon_0 = \hbar\omega_0 n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (31)$$

При таком подходе величина $\hbar\omega_0$ трактуется как «квант энергии» моды с собственной частотой ω_0 , число n интерпретируется как число не взаимодействующих друг с другом квантов энергии в стационарном состоянии системы, $\hat{a}^+ \hat{a}$ служит оператором числа квантов.

С точки зрения статистической физики указанные кванты энергии можно рассматривать как бозоны – частицы, подчиняющиеся статистике Бозе–Эйнштейна. Для этого типа статистики характерно отсутствие ограничений на максимально допустимое число частиц n (в случае же фермионов, то есть – частиц, подчиняющихся статистике Ферми–Дирака, в формуле (31) допускались бы лишь значения $n = 0, 1$). Операторы \hat{a}^+ и \hat{a} , характеризующиеся коммутационным соотношением (3), принято называть *бозонными операторами рождения и уничтожения*.

6.8. а) Наиболее экономно вычисление матричных элементов

$$x_{n'n} = \langle n' | \hat{x} | n \rangle \quad (1)$$

производится с помощью операторов \hat{a} и \hat{a}^+ , рассмотренных в задаче 6.7. Пользуясь формулами (26), (12) и (13) задачи 6.7, имеем:

$$\begin{aligned} x_{n'n} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n' | \hat{a} | n \rangle + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n' | \hat{a}^+ | n \rangle = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega_0}} \langle n' | n-1 \rangle + \sqrt{\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega_0}} \langle n' | n+1 \rangle. \end{aligned}$$

С учетом равенства $\langle n' | n'' \rangle = \delta_{n'n''}$, выражающего свойство ортонормированности стационарных состояний, получаем:

$$x_{n'n} = \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega_0}} \delta_{n', n-1} + \sqrt{\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega_0}} \delta_{n', n+1}. \quad (2)$$

Таким образом, отличные от нуля матричные элементы координаты можно записать в виде

$$x_{n-1, n} = x_{n, n-1} = \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega_0}}. \quad (3)$$

б) Соотношение (2) позволяет легко определять матричные элементы операторов \hat{x}^m . В частности, для среднего значения квадрата координаты находим, что

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \sum_{n'} \langle n | \hat{x} | n' \rangle \langle n' | \hat{x} | n \rangle = \\ &= \langle n | \hat{x} | n-1 \rangle \langle n-1 | \hat{x} | n \rangle + \langle n | \hat{x} | n+1 \rangle \langle n+1 | \hat{x} | n \rangle = \frac{\hbar}{m \omega_0} \left(n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Ниже мы воспроизведем результат (4) другим способом. Предварительно докажем одну полезную в вычислениях формулу для средних значений эрмитова оператора с дискретным спектром собственных значений.

Пусть $\hat{f}(\lambda)$ – эрмитов оператор физической величины, зависящей от вещественного параметра λ , f_k – собственные значения этого оператора. Те собственные векторы $|k\rangle$, которые принадлежат дискретным собственным значениям оператора \hat{f} , обладают сходящимся нормировочным интегралом и поэтому могут быть нормированы на единицу:

$$\langle k | k \rangle = 1. \quad (5)$$

Дифференцируя обе стороны равенства (5) по λ и обозначая $\partial|k\rangle/\partial\lambda = |\tilde{k}\rangle$, получаем:

$$\langle \tilde{k} | k \rangle + \langle k | \tilde{k} \rangle = 0. \quad (6)$$

Скалярно умножив на $|k\rangle$ обе стороны равенства

$$\hat{f}|k\rangle = f_k|k\rangle \quad (7)$$

и продифференцировав по λ получившееся с учетом (5) соотношение

$$\langle k | \hat{f} | k \rangle = f_k, \quad (8)$$

имеем:

$$\langle \tilde{k} | \hat{f} | k \rangle + \langle k | \frac{\partial \hat{f}}{\partial \lambda} | k \rangle + \langle k | \hat{f} | \tilde{k} \rangle = \frac{\partial f_k}{\partial \lambda}. \quad (9)$$

Здесь первое слагаемое в силу (7) равно $f_k \langle \tilde{k} | k \rangle$; третье слагаемое с учетом эрмитовости оператора \hat{f} и вещественности его собственных значений принимает вид

$$\langle k | \hat{f} | \tilde{k} \rangle = \langle \hat{f} k | \tilde{k} \rangle = f_k \langle k | \tilde{k} \rangle. \quad (10)$$

Таким образом, с учетом (6) два упомянутых члена в левой стороне (9) взаимно уничтожаются, и мы приходим к полезному соотношению:

$$\langle k | \frac{\partial \hat{f}}{\partial \lambda} | k \rangle = \frac{\partial f_k}{\partial \lambda}. \quad (11)$$

Проверим с помощью этой формулы результат (4), представив собственные значения $\hbar\omega_0(n+1/2)$ гамильтониана $\hat{H}_{осц}$ как его матричные элементы в базисе, образованном стационарными состояниями:

$$\langle n | \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{x}^2 \right) | n \rangle = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (12)$$

Дифференцируя левую и правую стороны этого равенства по ω_0 , получаем соотношение

$$m\omega_0 \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

подтверждающее справедливость формулы (4):

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega_0} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (13)$$

Отметим, что $\langle x \rangle = 0$ (так как диагональные матричные элементы (2) равны нулю), и поэтому найденная величина $\langle x^2 \rangle$ совпадает со среднеквадратичной неопределенностью $(\delta x)^2$ координаты осциллятора. Иными словами, неопределенность координаты равна

$$\delta x = \left(\frac{\hbar}{m\omega_0} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right)^{1/2}. \quad (14)$$

С учетом формул (12)–(13) и равенства $\langle p \rangle = 0$ (обоснование которому читатель легко найдет в качестве самостоятельного упражнения), имеем:

$$\delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \left(m \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) \right)^{1/2}. \quad (15)$$

Видно, что

$$\delta x \delta p = \hbar(n+1/2) \geq \hbar/2, \quad (16)$$

в согласии с соотношением неопределенности Гейзенберга.

6.9. а) Рассматриваемое состояние осциллятора имеет вид суперпозиции стационарных состояний $|n\rangle$,

$$|\alpha\rangle|_{t=0} = \sum_{n=0}^{\infty} A_n |n\rangle, \quad (1)$$

с коэффициентами

$$A_n = e^{-|\alpha|^2/2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}. \quad (2)$$

Экспоненциальный множитель в (2) обеспечивает нормировку вектора состояния (1) на единицу. Для того чтобы получить состояние $|\alpha\rangle$, отнесенное к произвольному моменту времени t , достаточно умножить A_n на $e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$, где $\varepsilon_n = \hbar\omega_0(n+1/2)$ – энергия стационарного состояния $|n\rangle$:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) |n\rangle, \quad (3)$$

$$A_n(t) = e^{-|\alpha|^2/2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}. \quad (4)$$

Приступим к вычислению $\langle x(t) \rangle = \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle$, пользуясь формулой (2) задачи 6.8:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle &= \sum_{n'} \sum_n A_{n'}(t)^* A_n(t) \langle n' | \hat{x} | n \rangle = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \sum_{n=0}^{\infty} A_{n-1}(t)^* A_n(t) \sqrt{n} + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \sum_{n=0}^{\infty} A_{n+1}(t)^* A_n(t) \sqrt{n+1}. \end{aligned} \quad (5)$$

В правой стороне (5) в первой из двух сумм член с $n=0$ равен нулю, так что здесь n можно заменить на $n+1$; это дает:

$$\langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t)^* A_{n+1}(t) \sqrt{n+1} + \text{к.с.}, \quad (6)$$

где «к.с.» означает выражение, комплексно сопряженное по отношению к предыдущему выражению, выписанному явно. С учетом (4) имеем:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t)^* A_{n+1}(t) \sqrt{n+1} &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^n \alpha^{n+1}}{n!} e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_{n+1})t/\hbar} = \\ &= \alpha e^{-|\alpha|^2 - i\omega_0 t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = \alpha e^{-i\omega_0 t}. \end{aligned} \quad (7)$$

Подставив (7) в (6), получим:

$$\langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \left(\alpha e^{-i\omega_0 t} + \alpha^* e^{i\omega_0 t} \right). \quad (8)$$

Запишем комплексную величину α в форме $\alpha = |\alpha| e^{i\delta}$ и обозначим

$$\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_0}} |\alpha| = C. \quad (9)$$

Это позволяет представить результат (8) в виде

$$\langle x(t) \rangle = C \cos(\omega_0 t - \delta). \quad (10)$$

Таким образом, среднее значение координаты осциллятора в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$ испытывает гармоническое колебание с частотой ω_0 , амплитуда C и начальная фаза δ которого определяются комплексным параметром α .

б) Из (3) следует, что для осциллятора, находящегося в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$, вероятность W_n обнаружить состояние $|n\rangle$ есть

$$W_n = |A_n(t)|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}. \quad (11)$$

Найдем среднее значение «числа квантов» n в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$:

$$\langle n \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} n W_n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{(n-1)!} e^{-|\alpha|^2} = |\alpha|^2 e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\alpha|^2.$$

Итак,

$$\langle n \rangle = |\alpha|^2, \quad (12)$$

и поэтому распределение вероятности (11) можно записать в виде

$$W_n = \frac{\langle n \rangle^n}{n!} e^{-\langle n \rangle}. \quad (13)$$

Выражение (13) называют распределением Пуассона.

Найдем среднее значение квадрата числа квантов:

$$\begin{aligned} \langle n^2 \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} n^2 W_n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \langle n \rangle^n}{(n-1)!} e^{-\langle n \rangle} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1) \langle n \rangle^{n+1}}{n!} e^{-\langle n \rangle} = \\ &= \langle n \rangle \sum_{n=0}^{\infty} n W_n + \langle n \rangle \sum_{n=0}^{\infty} W_n = \langle n \rangle^2 + \langle n \rangle . \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\langle n^2 \rangle = \langle n \rangle^2 + \langle n \rangle . \quad (14)$$

Отметим, что неопределенность δn оказывается равной корню квадратному из среднего значения n :

$$\delta n = \sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2} = \sqrt{\langle n \rangle} . \quad (15)$$

Эта величина растет с увеличением $\langle n \rangle$, однако относительная флуктуация числа квантов убывает:

$$\frac{\delta n}{\langle n \rangle} = \frac{1}{\sqrt{\langle n \rangle}} \ll 1 \text{ при } \langle n \rangle \gg 1 . \quad (16)$$

С величиной $\langle n \rangle$ связано среднее значение энергии осциллятора $\langle \varepsilon \rangle$. Действительно, заметим, что

$$\langle \varepsilon \rangle = \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle = \sum_{n'} \sum_n A_{n'}(t)^* A_n(t) \langle n' | \hat{H} | n \rangle , \quad (17)$$

и учтем равенство

$$\langle n' | \hat{H} | n \rangle = \hbar \omega_0 (n + 1/2) \delta_{n'n} . \quad (18)$$

В итоге (17) принимает вид

$$\langle \varepsilon \rangle = \hbar \omega_0 \langle n \rangle + \hbar \omega_0 / 2 . \quad (19)$$

С учетом (9) и (12) соотношение (19) можно записать так:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2} m \omega_0^2 C^2 + \frac{\hbar \omega_0}{2} . \quad (20)$$

Первое слагаемое в правой стороне (20) имеет вид выражения для энергии классического осциллятора, колеблющегося с амплитудой C . Если $|\alpha| \gg 1$, то

C велика по сравнению с квантово-механической амплитудой «нулевых колебаний» $\sqrt{\hbar/m\omega_0}$, и вторым слагаемым в (20) можно пренебречь. При этом $\langle n \rangle \gg 1$, так что относительные величины квантовых флуктуаций числа n и, следовательно, энергии ε малы. Все это, в совокупности с результатом (10), позволяет сказать, что в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$ с $|\alpha| \gg 1$ поведение квантового осциллятора в наибольшей степени напоминает картину гармонического колебания в классической механике.

6.10. а) Скалярно умножая левую и правую части приведенных в условии задачи равенств

$$\hat{c} |1\rangle = |0\rangle, \quad \hat{c} |0\rangle = 0, \quad (1)$$

на $|0\rangle$, а также на $|1\rangle$, находим вид оператора \hat{c} в матричном представлении:

$$\hat{c} = \begin{pmatrix} c_{00} & c_{01} \\ c_{10} & c_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $c_{nn'} = \langle n | \hat{c} | n' \rangle$. Матрица, эрмитово сопряженная по отношению к матрице \hat{c} , имеет вид:

$$\hat{c}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Действуя этой матрицей на столбцы, изображающие компоненты базисных векторов,

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

получаем:

$$\hat{c}^+ |0\rangle = |1\rangle, \quad \hat{c}^+ |1\rangle = 0. \quad (5)$$

Таким образом, если \hat{c} – оператор, уничтожающий возбужденное состояние, то \hat{c}^+ – «повышающий» оператор: действуя на основное состояние, он порождает возбужденное состояние системы.

б) Перемножение матриц (2) и (3) дает:

$$\hat{c} \hat{c}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{c}^+ \hat{c} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Следовательно:

$$\{\hat{c}, \hat{c}^+\} \equiv \hat{c}\hat{c}^+ + \hat{c}^+\hat{c} = 1. \quad (7)$$

Аналогично проверяется, что $\hat{c}\hat{c} = 0$, $\hat{c}^+\hat{c}^+ = 0$, и, следовательно,

$$\{\hat{c}, \hat{c}\} = 0, \quad \{\hat{c}^+, \hat{c}^+\} = 0. \quad (8)$$

в) Из (6) видно, что оператор $\varepsilon_1 \hat{c}^+ \hat{c}$ в базисе $|0\rangle$, $|1\rangle$ имеет диагональную форму, причем состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ принадлежат собственным значениям $\varepsilon_0 = 0$ и ε_1 , соответственно. Поэтому данный оператор можно трактовать как гамильтониан рассматриваемой системы:

$$\hat{H} = \varepsilon_1 \hat{c}^+ \hat{c}. \quad (9)$$

Операторы \hat{c} и \hat{c}^+ , характеризующиеся свойствами (7)–(8), называют *фермионными операторами уничтожения и рождения*; такие операторы широко используются в задачах квантовой статистической физики наряду с бозонными операторами \hat{a} и \hat{a}^+ , рассматривавшимися в задаче 6.7. О системе с гамильтонианом (9) иногда говорят как о «фермионном осцилляторе».

Глава 7. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

Понятие момента импульса в квантовой теории полностью связано с результатами математического исследования так называемой группы вращений (совокупности преобразований симметрии сферы). Применению в квантовой механике методов теории групп посвящена обширная учебная литература; ниже приводится лишь небольшой перечень основных формул.

Эрмитовыми операторами проекций момента импульса $\hbar \hat{J}_x$, $\hbar \hat{J}_y$ и $\hbar \hat{J}_z$ определяются унитарные операторы $\hat{R}(\alpha)$ поворотов на произвольные углы α_x , α_y и α_z вокруг координатных осей:

$$\hat{R}(\alpha_x \mathbf{e}_x) = e^{-i\alpha_x \hat{J}_x}, \quad \hat{R}(\alpha_y \mathbf{e}_y) = e^{-i\alpha_y \hat{J}_y}, \quad \hat{R}(\alpha_z \mathbf{e}_z) = e^{-i\alpha_z \hat{J}_z}. \quad (\text{I})$$

Векторный оператор момента импульса имеет вид

$$\hat{\mathbf{J}} = \mathbf{e}_x \hat{J}_x + \mathbf{e}_y \hat{J}_y + \mathbf{e}_z \hat{J}_z. \quad (\text{II})$$

Скалярный оператор квадрата момента определен формулой

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2. \quad (\text{III})$$

Важную роль играют операторы \hat{J}_+ и \hat{J}_- , эрмитово сопряженные по отношению друг к другу,

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i \hat{J}_y, \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i \hat{J}_y. \quad (\text{IV})$$

Справедливы следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i \hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i \hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i \hat{J}_y; \quad (\text{V})$$

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_x] = 0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_y] = 0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z] = 0. \quad (\text{VI})$$

Из (V) следует, что не существует квантовых состояний, в которых при не равном нулю моменте все три проекции момента имели бы определенное значение; величины J_x , J_y и J_z одновременно не измеримы. Поэтому состояниями с определенным моментом называют векторы состояний $|j, m\rangle$, являющиеся собственными векторами не для оператора момента $\hat{\mathbf{J}}$, а для коммутирующих друг с другом операторов квадрата момента $\hat{\mathbf{J}}^2$ и проекции момента \hat{J}_z :

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle, \quad (\text{VII})$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle, \quad (\text{VIII})$$

где $j(j+1)$ – собственные значения квадрата момента. Если в качестве момента рассматривается только орбитальный момент импульса или полный момент (с учетом спина) при условии, что частицы имеют целочисленный спин, то допустимыми значениями j являются лишь целые числа:

$$j = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{IX})$$

Если же частицы имеют полуцелый спин, то спектр значений полного момента j содержит как целые так и полуцелые числа:

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (\text{X})$$

Величина j называется *абсолютной величиной момента* в состояниях $|j, m\rangle$. При заданном значении j проекция момента J_z (ее принято обозначать буквой m) принимает $2j+1$ значений с шагом, равным единице:

$$m = j, j-1, \dots, -j. \quad (\text{XI})$$

В базисе, образованном состояниями $|j, m\rangle$ с заданным j , матрица оператора \hat{J}_z диагональна; ее диагональными элементами являются указанные выше значения m . При этом не равные нулю матричные элементы операторов \hat{J}_x и \hat{J}_y можно найти по формулам

$$\begin{aligned} \langle m+1 | \hat{J}_x | m \rangle &= \langle m | \hat{J}_x | m+1 \rangle = (1/2) \sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \\ \langle m+1 | \hat{J}_y | m \rangle &= -\langle m | \hat{J}_y | m+1 \rangle = (-i/2) \sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \end{aligned} \quad (\text{XII})$$

а матрицы операторов \hat{J}_+ и \hat{J}_- определяются из соотношений

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ |j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle, \\ \hat{J}_- |j, m+1\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m\rangle. \end{aligned} \quad (\text{XIII})$$

Орбитальный момент импульса частицы описывается векторным оператором $\hat{\mathbf{l}}$, действующим на волновую функцию. В координатном представлении он имеет вид (в единицах \hbar):

$$\hat{\mathbf{l}} = (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) / \hbar = -i \mathbf{r} \times \nabla, \quad (\text{XIV})$$

или, в сферической системе координат (r, θ, φ) ,

$$\hat{\mathbf{I}} = -i \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (\text{XV})$$

Операторы проекций орбитального момента

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= -i \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), & \hat{l}_y &= -i \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{l}_z &= -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (\text{XVI})$$

удовлетворяют коммутационным соотношениям (V), (VI). Оператор квадрата орбитального момента

$$\hat{\mathbf{I}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (\text{XVII})$$

может быть выражен через угловую часть оператора Лапласа, так как в сферической системе координат оператор Лапласа имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \hat{\mathbf{I}}^2. \end{aligned} \quad (\text{XVIII})$$

Собственными значениями оператора $\hat{\mathbf{I}}^2$ являются числа $l(l+1)$ где l – абсолютная величина орбитального момента импульса. Эта величина принимает только целочисленные значения:

$$l = 0, 1, 2, \dots$$

В случае движения частицы в сферически симметричном поле, $U(\mathbf{r}) = U(r)$, гамильтониан \hat{H} и операторы $\hat{\mathbf{I}}^2$, \hat{l}_z коммутативны друг с другом. Поэтому величина орбитального момента и проекция орбитального момента на одно произвольное направление, выбираемое в качестве оси z , представляют собой сохраняющиеся величины (интегралы движения).

Решения ψ уравнения Шредингера со сферически симметричным потенциалом,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}),$$

могут быть найдены в виде волновых функций стационарных состояний с определенной величиной l и проекцией орбитального момента $m = l, l-1, \dots, -l$:

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (\text{XIX})$$

где

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r},$$

причем вспомогательная функция $\chi(r)$ – решение уравнения, по форме совпадающего с одномерным уравнением Шредингера:

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - U(r) \right) \chi(r) = 0. \quad (\text{XX})$$

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ определяются (с точностью до фазового множителя) формулой

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

где $P_l^{(m)}(\cos\theta)$ – присоединенные полиномы Лежандра:

$$P_l^{(m)}(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} \sin^m \theta \frac{d^{l+m}}{(d \cos \theta)^{l+m}} (\cos^2 \theta - 1)^l. \quad (\text{XXII})$$

Приведем явные выражения нескольких первых функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$:

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

Во многих задачах потенциал $U(r)$ обладает свойством

$$\lim r^2 U(r) = 0 \quad \text{при } r \rightarrow 0.$$

В таких случаях требование ограниченности волновой функции (XIX) приводит

к тому, что «радиальная» функция $R(r)$ вблизи начала координат обладает следующим поведением:

$$R_l(r) \sim r^l, \quad r \rightarrow 0. \quad (\text{XXIII})$$

При этом $\chi(r)$ удовлетворяет граничному условию вида

$$\chi(0) = 0. \quad (\text{XXIV})$$

При $r \rightarrow \infty$ поведение $R(r)$ определяется тем, к какой части энергетического спектра относятся рассматриваемые состояния. Если решения χ уравнения (XX) принадлежат дискретным уровням энергии ε , то для них справедлива так называемая *осцилляционная теорема*. Согласно этой теореме низшему уровню ε принадлежит функция χ , не имеющая ни одного узла, а каждому следующему уровню в порядке возрастания ε соответствует решение с большим на единицу числом узлов. Очевидно, функции $R(r) = \chi(r)/r$ и $\chi(r)$ имеют одно и то же число узлов; это число n_r называется радиальным квантовым числом. Функция $R(r) \equiv R_{n_r, l}(r)$, принадлежащая дискретному уровню энергии $\varepsilon = \varepsilon_{n_r, l}$, при увеличении r от нуля до бесконечности совершает n_r осцилляций и затем монотонно убывает так, что нормировочный интеграл для волновой функции оказывается сходящимся и может быть выбран равным единице:

$$\int d^3\mathbf{r} |\psi_{n_r, l, m}|^2 = \int_0^\infty dr r^2 |R_{n_r, l}|^2 \int d\Omega |Y_{lm}|^2 = \int_0^\infty dr r^2 |R_{n_r, l}|^2 = 1.$$

Функции же $R(r) \equiv R_{kl}(r)$, принадлежащие значениям $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ в непрерывной части энергетического спектра, убывают на бесконечности не монотонно и не столь быстро, их нормировочные интегралы расходятся. Эти функции имеют бесконечно много узлов, причем осцилляции $R_{kl}(r)$ при $r \rightarrow \infty$ характеризуются длиной волны λ , которая, как обычно, связана с волновым числом k равенством $\lambda = 2\pi/k$.

Задачи

7.1. Для состояния $|j, m\rangle$ с определенным значением величины момента импульса j и проекции момента $J_z = m$ найти средние значения квадратов проекций момента на декартовы координатные оси.

7.2. Для состояния $|j, m\rangle$ найти среднее значение проекции момента $J_{\mathbf{n}}$ на произвольное направление, задаваемое единичным вектором \mathbf{n} .

7.3. Пусть $|j, \tilde{m}\rangle$ – состояние с определенной величиной момента и проекцией момента $J_{\mathbf{n}} = m$ на некоторое направление, заданное единичным вектором \mathbf{n} . Найти усредненный вектор момента $\langle \mathbf{J} \rangle$.

7.4. Частица находится в состоянии $|1, m\rangle$ с определенной проекцией момента $J_z = m$; величина момента $j = 1$. Найти вероятности различных значений проекции момента на новую ось \tilde{z} , составляющую с первоначальной осью z заданный угол θ .

7.5. Для свободно движущейся частицы найти волновые функции стационарных состояний с определенной величиной орбитального момента и определенной проекцией момента.

7.6. Свободная частица движется с определенным импульсом $p = \hbar k$ в положительном направлении оси z .

а) Определить возможные значения проекции орбитального момента на ось z .

б) Как зависит от k вероятность того, что частица будет обладать моментом l (относительно начала координат)?

7.7. Частица движется в сферически симметричном поле $U(\mathbf{r}) = m \omega_0^2 r^2 / 2$ (пространственный осциллятор). Для стационарных состояний вида $\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z)$, принадлежащих уровню энергии, ближайшему к основному энергетическому уровню, найти:

а) Усредненный вектор орбитального момента $\langle \mathbf{l} \rangle$.

б) Вероятность W_{lm} значений величины орбитального момента l и проекции момента $l_z \equiv m$.

7.8. Частица движется в двумерном «кулоновском» поле

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha}{r}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \alpha > 0.$$

Найти энергетический спектр связанных состояний частицы при любом допустимом значении проекции момента l_z .

Решения

7.1. Исходим из того, что под действием операторов

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i \hat{J}_y \quad (1)$$

вектор состояния $|j, m\rangle$ превращается в $C|j, m \pm 1\rangle$ и поэтому, с учетом взаимной ортогональности состояний $|j, m\rangle$ с различающимися значениями m , имеют место два равенства:

$$\langle j, m | (\hat{J}_x \pm i \hat{J}_y) | j, m \rangle = 0 . \quad (2)$$

Выделив в (2) вещественную и мнимую части, имеем:

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0 . \quad (3)$$

В силу упомянутого обстоятельства справедливы также равенства

$$\langle j, m | (\hat{J}_x \pm i \hat{J}_y)^2 | j, m \rangle = 0 ,$$

то есть

$$\langle j, m | (\hat{J}_x^2 \pm i (\hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x) - \hat{J}_y^2) | j, m \rangle = 0 . \quad (4)$$

Отсюда следует, что

$$\langle j, m | (\hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x) | j, m \rangle = 0 \quad (5)$$

и

$$\langle j, m | (\hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2) | j, m \rangle = 0 ,$$

то есть

$$\langle J_x^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle . \quad (6)$$

Заметим теперь, что с учетом (6)

$$\langle J_x^2 + J_y^2 \rangle = 2 \langle J_x^2 \rangle = 2 \langle J_y^2 \rangle . \quad (7)$$

С другой стороны,

$$\langle J_x^2 + J_y^2 \rangle = \langle j, m | (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2) | j, m \rangle = j(j+1) - m^2 . \quad (8)$$

Таким образом,

$$\langle J_x^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle = \frac{1}{2} (j(j+1) - m^2) . \quad (9)$$

Отметим, что при $m = \pm j$ усредненные квадраты проекций момента (9) достигают наименьшего значения; оно равно $j/2$ и не обращается в нуль при всех $j > 0$. Поскольку этот факт имеет место наряду с равенствами (3), он указывает на присутствие «квантовых флуктуаций» величин J_x , J_y . Другими словами, в состояниях $|j, m\rangle$, характеризующихся определенными значениями J^2 и J_z , величины J_x и J_y не имеют определенных значений.

Действуя $n - 1$ раз оператором \hat{J}_z на обе стороны равенства

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle \quad (10)$$

и скалярно умножая результат на $|j, m\rangle$, приходим к соотношению

$$\langle J_z^n \rangle = m^n = \langle J_z \rangle^n. \quad (11)$$

Подобные соотношения между средними значениями (при любом n) характерны для не флуктуирующей величины.

7.2. Оператор проекции момента $J_{\mathbf{n}}$ на направление, задаваемое единичным вектором \mathbf{n} , имеет вид

$$\hat{J}_{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} = n_x \hat{J}_x + n_y \hat{J}_y + n_z \hat{J}_z. \quad (1)$$

Среднее значение этого оператора есть

$$\langle J_{\mathbf{n}} \rangle = n_x \langle J_x \rangle + n_y \langle J_y \rangle + n_z \langle J_z \rangle. \quad (2)$$

Для состояния $|j, m\rangle$ справедливы соотношения

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0, \quad \langle J_z \rangle = m. \quad (3)$$

Учитывая также равенство $n_z = \cos \theta$, окончательно запишем искомое среднее значение (2) следующим образом:

$$\langle J_{\mathbf{n}} \rangle = m \cos \theta, \quad (4)$$

где θ – угол между направлением вектора \mathbf{n} и направлением оси z , по отношению к которой определены базисные состояния $|j, m\rangle$. Отметим, что равенства (3) теперь можно трактовать как частные случаи формулы (4) при $\theta = \pi/2$ и $\theta = 0$.

7.3. В общем случае справедливо равенство

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{J} \rangle &= \langle \psi | (\mathbf{e}_x \hat{J}_x + \mathbf{e}_y \hat{J}_y + \mathbf{e}_z \hat{J}_z) | \psi \rangle = \\ &= \mathbf{e}_x \langle J_x \rangle + \mathbf{e}_y \langle J_y \rangle + \mathbf{e}_z \langle J_z \rangle .\end{aligned}\quad (1)$$

Здесь направление ортов \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y , \mathbf{e}_z декартовой системы координат не конкретизировано и может быть выбрано произвольным образом. Выберем систему координат так, чтобы ось z была направлена вдоль заранее заданного единичного вектора \mathbf{n} , то есть положим

$$\mathbf{e}_z = \mathbf{n} . \quad (2)$$

По отношению к такой системе координат указанное в условии задачи состояние $|\psi\rangle = |j, \tilde{m}\rangle$ является обычным состоянием $|j, m\rangle$ и поэтому характеризуется равенствами

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0 , \quad \langle J_z \rangle = m . \quad (3)$$

Учитывая (2) и (3) в (1), получаем искомый усредненный вектор момента импульса

$$\langle \mathbf{J} \rangle = m \mathbf{n} . \quad (4)$$

Таким образом, в состоянии с определенной проекцией m момента импульса на заданное направление \mathbf{n} усредненный вектор момента $\langle \mathbf{J} \rangle$ в зависимости от знака m параллелен или антипараллелен \mathbf{n} (либо равен нулю, если $m = 0$).

7.4. Обозначим посредством $|j = 1, \tilde{m}'\rangle$ состояния с определенными значениями $J_{\tilde{z}} = m'$ проекции момента на ось \tilde{z} , составляющую с исходной осью z заданный угол θ . Амплитуда вероятности обнаружить значение $J_{\tilde{z}} = m'$ у частицы в состоянии $|j = 1, m\rangle$ равна скалярному произведению $\langle j = 1, \tilde{m}' | j = 1, m \rangle$, а сама вероятность равна квадрату модуля этой амплитуды. Заметим, что любое из трех ($m' = 1, 0, -1$) состояний $|j = 1, \tilde{m}'\rangle$ можно рассматривать как результат действия оператора поворота $\hat{R}(\theta \mathbf{e}_y)$ на состояние $|j = 1, m'\rangle$ с тем же самым значением проекции момента, $J_z = J_{\tilde{z}} = m'$:

$$|j, \tilde{m}'\rangle = \hat{R}(\theta \mathbf{e}_y) |j, m'\rangle . \quad (1)$$

Поэтому интересующие нас амплитуды вероятности будут найдены, если удастся определить матричные элементы оператора поворота $\hat{R}(-\theta \mathbf{e}_y)$ в базисе $|j = 1, m\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle j, \tilde{m}' | j, m \rangle &= \langle \hat{R}(\theta \mathbf{e}_y) j, m' | j, m \rangle = \langle j, m' | \hat{R}^+(\theta \mathbf{e}_y) | j, m \rangle = \\ &= \langle j, m' | \hat{R}^{-1}(\theta \mathbf{e}_y) | j, m \rangle = \langle j, m' | \hat{R}(-\theta \mathbf{e}_y) | j, m \rangle . \end{aligned} \quad (2)$$

Требуемую матрицу можно получить несколькими способами (в общем случае результаты окажутся различными из-за произвола в выборе фазовых множителей у базисных векторов состояния, но такое различие не отразится на значениях квадратов модулей матричных элементов). Рассмотрим подробно два способа, тем самым иллюстрируя на данном примере ряд общих соотношений квантово-механической теории момента импульса.

Первый способ основан на определении с помощью элементарных геометрических соображений матрицы \hat{R}' поворота на угол θ вокруг оси y в базисе, образованном состояниями с «линейной поляризацией» $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$. Такие состояния рассматривались в задаче 3.9 применительно к массивной частице с собственным моментом импульса $j=1$. Матрица указанного поворота \hat{R} в базисе $|j, m\rangle$ будет связана с матрицей \hat{R}' формулой

$$\langle m' | \hat{R} | m \rangle = \sum_{k'} \sum_k \langle m' | k' \rangle \langle k' | \hat{R} | k \rangle \langle k | m \rangle , \quad (3)$$

где $k', k = x, y, z$, состояния $|j=1, m\rangle$ сокращенно обозначены посредством $|m\rangle$. Элементами матрицы \hat{R}' являются величины $(\hat{R}')_{k'k} = \langle k' | \hat{R} | k \rangle$, присутствующие в правой стороне равенства (3). Рассматривая величины $\langle k | m \rangle$ как элементы некоторой унитарной матрицы \hat{U} (причем мы условимся нумеровать состояния $|m\rangle$ в порядке убывания значений $m = 1, 0, -1$, так что, например, $U_{13} = \langle x | m = -1 \rangle$), можно представить формулу (3) в виде матричного равенства:

$$\hat{R} = \hat{U}^+ \hat{R}' \hat{U} . \quad (4)$$

Будем определять матрицу $\hat{R}'(\theta \mathbf{e}_y)$, исходя из предположения, что состояния $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ под действием поворотов преобразуются как обычные орты $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$. Такое преобразование при повороте на угол θ вокруг оси y схематически показано на рис. 7.1 (ось y перпендикулярна плоскости рисунка и направлена «от нас»).

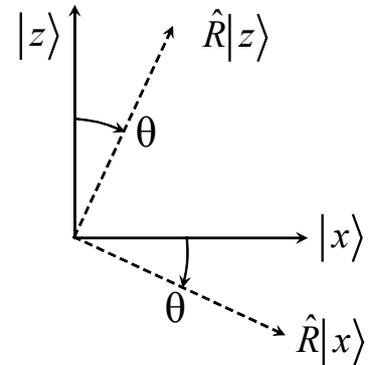


Рис. 7.1

Спроецировав векторы $\hat{R}|k\rangle$ на исходные направления $|k\rangle$, имеем:

$$\begin{aligned}\hat{R}|x\rangle &= \cos\theta|x\rangle - \sin\theta|z\rangle, \\ \hat{R}|y\rangle &= |y\rangle, \\ \hat{R}|z\rangle &= \sin\theta|x\rangle + \cos\theta|z\rangle.\end{aligned}\quad (5)$$

Скалярно умножая равенства (5) на базисные векторы $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ и учитывая свойство ортонормированности этих базисных состояний, находим матрицу $\hat{R}'(\theta\mathbf{e}_y)$:

$$\hat{R}' = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}.\quad (6)$$

Согласно пояснениям в задаче 3.9 состояние $|j=1, m=0\rangle$ совпадает с $|z\rangle$, а два других состояния с определенной проекцией момента представляют собой линейные комбинации векторов состояния $|x\rangle$ и $|y\rangle$, так что:

$$\begin{aligned}|j=1, m=1\rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} (|x\rangle + i|y\rangle), \\ |j=1, m=0\rangle &= |z\rangle, \\ |j=1, m=-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle - i|y\rangle).\end{aligned}\quad (7)$$

В первой из этих формул введен дополнительный (по сравнению с (6) в задаче 3.9) фазовый множитель -1 , который позволит нам избежать упоминавшегося выше различия выражений для матрицы \hat{R} , получаемых разными способами. Скалярно умножая равенства (7) на базисные векторы $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$, находим величины $\langle k|m\rangle$, составляющие матрицу \hat{U} :

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.\quad (8)$$

Эта матрица, как легко проверить, унитарна. Эрмитово сопряженная матрица имеет вид

$$\hat{U}^+ = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Подставив (6), (8) и (9) в (4) и перемножив указанные матрицы, получаем искомую матрицу \hat{R} , элементами которой являются величины $\langle j, m' | \hat{R}(\theta \mathbf{e}_y) | j, m \rangle$ при $j = 1$:

$$\hat{R}(\theta \mathbf{e}_y) = \begin{pmatrix} \frac{1 + \cos \theta}{2} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1 - \cos \theta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \cos \theta & \frac{-1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1 - \cos \theta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1 + \cos \theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Выведем формулу (10) другим способом, не опираясь на результаты предшествующих задач. Согласно равенствам (XII) из введения к данной главе матрица оператора \hat{J}_y в базисе, образованном состояниями $|j, m\rangle$, имеет вид:

$$\hat{J}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Воспользуемся определением (I) для оператора поворота вокруг оси y и разложим присутствующую в формуле (I) экспоненту в ряд Тейлора по степеням угла поворота:

$$\hat{R}(\theta \mathbf{e}_y) = e^{-i\theta \hat{J}_y} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\theta)^n \hat{J}_y^n. \quad (12)$$

Вычисляя с помощью (11) различные степени матрицы \hat{J}_y , имеем:

$$\hat{J}_y^2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$\hat{J}_y^3 = \hat{J}_y. \quad (14)$$

Следовательно,

$$\hat{j}_y^n = \begin{cases} \hat{J}_y^2, & n = 2, 4, 6, \dots \\ \hat{J}_y, & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (15)$$

С учетом (15) степенной ряд (12) принимает вид:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\theta)^n \hat{j}_y^n &= \hat{1} + \hat{J}_y^2 \left(-\frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \dots \right) - i\hat{J}_y \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots \right) = \\ &= \hat{1} + \hat{J}_y^2 (\cos \theta - 1) - i\hat{J}_y \sin \theta. \end{aligned} \quad (16)$$

Подставив в правую сторону этого равенства явные выражения для матриц (11), (13) и для единичной матрицы $\hat{1}$, получаем результат (10).

Для нахождения вероятностей, требуемых условием задачи, достаточно в соответствии с формулой (2) произвести в (10) замену $\theta \rightarrow -\theta$ и возвести элементы получившейся матрицы в квадрат. Указанное изменение знака θ , как видно, не будет влиять на окончательный результат. В состоянии $|j=1, m=1\rangle$ вероятности значений $J_{\tilde{z}} = 1, 0, -1$ равны, соответственно, квадратам элементов первого столбца матрицы (10):

$$\frac{1}{4}(1 + \cos \theta)^2, \quad \frac{1}{2} \sin^2 \theta, \quad \frac{1}{4}(1 - \cos \theta)^2. \quad (17)$$

В состоянии $|j=1, m=0\rangle$ вероятности значений $J_{\tilde{z}} = 1, 0, -1$ равны квадратам элементов второго столбца матрицы (10):

$$\frac{1}{2} \sin^2 \theta, \quad \cos^2 \theta, \quad \frac{1}{2} \sin^2 \theta. \quad (18)$$

Наконец, в состоянии $|j=1, m=-1\rangle$ вероятности значений $J_{\tilde{z}} = 1, 0, -1$ равны, соответственно, квадратам элементов третьего столбца матрицы (10):

$$\frac{1}{4}(1 - \cos \theta)^2, \quad \frac{1}{2} \sin^2 \theta, \quad \frac{1}{4}(1 + \cos \theta)^2. \quad (19)$$

В качестве проверки можно, пользуясь формулами (17) – (19), подсчитать средние значения $\langle J_{\tilde{z}} \rangle$ в состояниях $|j=1, m\rangle$ и убедиться в том, что для рассматриваемого здесь случая ($j=1$) найденное в задаче 7.2 соотношение

$$\langle J_{\tilde{z}} \rangle = m \cos \theta, \quad (20)$$

как и должно быть, выполняется.

7.5. Согласно формулам (XIX)–(XXI) введения к данной главе решение уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = \varepsilon \psi, \quad (1)$$

характеризующееся определенной величиной орбитального момента l и проекцией момента m (не путать с массой частицы!), будем искать в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\chi(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (2)$$

Вспомогательная функция $\chi(r)$ должна удовлетворять уравнению

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi(r) = 0 \quad (3)$$

и граничному условию

$$\chi(0) = 0. \quad (4)$$

Волновое число $k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$, как обычно, определяется значением энергии частицы ε .

Разделим обе стороны уравнения (3) на k^2 и перейдем к безразмерной координатной переменной

$$\xi = kr. \quad (5)$$

Выполнив в (3) подстановку

$$\chi(\xi) = \xi^\alpha w(\xi) \quad (6)$$

и выбрав затем $\alpha = 1/2$, можно представить (3) в форме уравнения Бесселя для новой вспомогательной функции $w(\xi)$:

$$\frac{d^2 w(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{dw(\xi)}{d\xi} + \left(1 - \frac{(l+1/2)^2}{\xi^2} \right) w(\xi) = 0. \quad (7)$$

В качестве двух линейно независимых решений уравнения (7) достаточно рассматривать функцию Бесселя $J_\nu(\xi)$ и функцию Неймана $N_\nu(\xi)$ порядка $\nu = l + 1/2$. Общее решение тогда будет иметь вид линейной комбинации этих функций:

$$w(\xi) = C_1 J_{l+1/2}(\xi) + C_2 N_{l+1/2}(\xi), \quad (8)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots$. Постоянные C_1 и C_2 в (8) необходимо выбрать так, чтобы

выполнялось граничное условие (4), то есть следует требовать, чтобы

$$\xi^{1/2} w(\xi) \rightarrow 0 \text{ при } \xi \rightarrow 0 . \quad (9)$$

Известно, что при малом значении аргумента функция $J_\nu(\xi)$ ведет себя как ξ^ν , а функция $N_\nu(\xi)$ порядка $\nu \neq 0$ – как $\xi^{-\nu}$ (если $\nu = 0$, то функция Неймана ведет себя как $\ln \xi$). Таким образом, поскольку в рассматриваемой задаче $\nu \geq 1/2$, для выполнения условия (9) мы должны постоянную C_2 положить равной нулю. В результате искомые волновые функции (2) запишутся в виде

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) = C_1 \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) , \quad (10)$$

где C_1 – нормировочная постоянная.

Учитывая асимптотическое поведение функций Бесселя

$$J_\nu(\xi) \approx \left(\frac{\xi}{2}\right)^\nu \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \text{ при } \xi \ll 1 , \quad (11)$$

$$J_\nu(\xi) \approx \left(\frac{2}{\pi\xi}\right)^{1/2} \cos\left(\xi - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \text{ при } \xi \rightarrow \infty , \quad (12)$$

мы видим, что вблизи начала координат зависимость найденной волновой функции ψ_{klm} от r имеет вид r^l , а на больших расстояниях от начала координат волновая функция асимптотически приближается к виду так называемой сферической волны $r^{-1} \sin(kr - \delta)$:

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) \approx C_1 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) Y_{lm}(\theta, \varphi) , \quad kr \rightarrow \infty . \quad (13)$$

Эти результаты согласуются с общими утверждениями о поведении волновой функции ψ_{klm} , указанными во введении к данной главе.

Рассмотрим некоторые из возможных способов нормировки волновой функции (10). Мы воспользуемся соображениями, аналогичными изложенным в решении задачи 5.3 (пункт б). Поскольку нормировочный интеграл для функции (10) расходится в области $r \rightarrow \infty$, можно считать вклад этой области основным, и заменить под знаком интеграла функцию (10) ее асимптотическим выражением (13). Это дает:

$$\int_0^\infty dr r^2 \int d\Omega |\psi_{klm}|^2 = |C_1|^2 \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dr r^2 \left(\frac{1}{kr} \sin(kr - \pi l/2)\right)^2$$

«Обрежем» верхний предел интегрирования, заменив ∞ произвольно большой величиной a . Величина a имеет смысл радиуса сферической полости, внутри которой рассматривается свободное движение частицы. Заменив также квадрат синуса его средним значением $1/2$, получаем нормировочный интеграл в виде:

$$\int d^3\mathbf{r} |\psi_{klm}|^2 = |C_1|^2 \frac{a}{\pi k^2}, \quad a \gg 1/k. \quad (14)$$

Для нормировки волновой функции на единицу в шаре радиуса a приравняем выражение (14) единице:

$$|C_1|^2 \frac{a}{\pi k^2} = 1. \quad (15)$$

Тогда $C_1 = \sqrt{\pi k^2 / a}$, и волновая функция (10) принимает вид

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\pi k^2}{a}} \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (16)$$

В случае нормировки на δ -функцию от волнового числа правую часть равенства (14) следует понимать как величину $2\pi \delta(k - k')$ при $k - k' = 0$. Эта величина, с учетом представления δ -функции в интегральной форме

$$2\pi \delta(k - k') = \int_{-\infty}^{\infty} dr e^{i(k-k')r},$$

может быть приравнена $2a$, где $a \rightarrow \infty$. Таким образом, заменив в правой стороне (15) единицу величиной $2a$, получаем $C_1 = \sqrt{2\pi k^2}$, и

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (17)$$

Функции (17) удовлетворяют следующим условиям нормировки и взаимной ортогональности:

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_{k'l'm'}^* \psi_{klm} = 2\pi \delta(k' - k) \delta_{ll'} \delta_{m'm}. \quad (18)$$

Наконец, убедимся в том, что при $l = 0$ полученные волновые функции принимают вид сферических волн, которые обсуждались в задаче 4.11. Функции Бесселя полуцелого порядка, как известно, могут быть выражены через элементарные функции:

$$J_{l+1/2}(\xi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \xi^{l+1/2} \left(-\frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \right)^l \frac{\sin \xi}{\xi} . \quad (19)$$

Это позволяет выписывать волновые функции $\psi_{klm}(\mathbf{r})$ в более развернутой форме. В частности, при $l=0$ с учетом равенства $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$ формула (16) дает:

$$\psi_{klm}(\mathbf{r})|_{l=0} = \sqrt{\frac{\pi k^2}{a}} \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{1/2}(kr) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{\chi_k(r)}{r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} , \quad (20)$$

где

$$\chi_k(r) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin kr . \quad (21)$$

Таким образом, здесь воспроизводится найденное в задаче 4.11 описание свободного движения частицы с равным нулю моментом импульса.

7.6. а) Согласно условию задачи волновую функцию частицы $\phi(\mathbf{r})$ можно записать (без учета нормировочного множителя) в виде:

$$\phi_k(\mathbf{r}) = e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} . \quad (1)$$

Функция (1) не зависит от угловой координаты φ и, следовательно, под действием оператора поворотов вокруг оси z остается неизменной. Это означает, что в состоянии (1) частица обладает равной нулю проекцией момента импульса на ось z .

б) Для того чтобы найти вероятность различных значений величины момента l , разложим волновую функцию (1) по волновым функциям ψ_{klm} , отвечающим свободному движению с определенными значениями величины импульса $\hbar k$, момента импульса l и проекции момента $l_z = m$. В такое разложение войдут только состояния с $l_z = 0$:

$$\phi_k(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l \psi_{kl0}(\mathbf{r}) . \quad (2)$$

Прежде чем приступить к вычислению коэффициентов разложения A_l , рассмотрим нормировочный интеграл для плоской волны (1), записав его в виде:

$$\int d^3\mathbf{r} \phi_{k'}(\mathbf{r})^* \phi_k(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i(k-k')z} = L^2 2\pi \delta(k'-k) . \quad (3)$$

Здесь посредством L^2 обозначена бесконечная величина площади в плоскости $xу$, перпендикулярной направлению движения частицы. Наличие в (3) δ -функции указывает на целесообразность выбора в роли ψ_{klm} тех функций, которые удовлетворяют условию нормировки на δ -функцию от волнового числа (см. формулы (17) и (18) задачи 7.5):

$$\psi_{kl0}(\mathbf{r}) = \sqrt{2\pi k^2} \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l+1/2}(kr) Y_{l0}(\theta)$$

При этом подстановка разложения (2) в левую часть равенства (3) дает:

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r} \phi_{k'}(\mathbf{r})^* \phi_k(\mathbf{r}) &= \sum_{l'} \sum_l A_{l'}^* A_l \int d^3\mathbf{r} \psi_{k'l'0}^* \psi_{kl0} = \\ &= \sum_{l'} \sum_l A_{l'}^* A_l \delta_{l'l} 2\pi \delta(k'-k) = \sum_{l=0}^{\infty} |A_l|^2 2\pi \delta(k'-k) . \end{aligned} \quad (4)$$

Сравнивая (3) и (4), получаем:

$$\sum_{l=0}^{\infty} |A_l|^2 = L^2 , \quad L \rightarrow \infty . \quad (5)$$

Из равенства (5) видно, что «вероятность» $|A_l|^2$ будет иметь размерность площади и может быть наглядно истолкована как «прицельная площадь» в плоскости $xу$, на которую должна попасть частица, движущаяся параллельно оси z , если ее момент равен l . Следуя [1], обозначим эту величину посредством σ_l :

$$\sigma_l = |A_l|^2 . \quad (6)$$

Перейдем к вычислению амплитуд вероятности A_l . Запишем разложение (2) в явной форме:

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l'=0}^{\infty} A_{l'} \sqrt{2\pi k^2} \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l'+1/2}(kr) Y_{l'0}(\theta) . \quad (7)$$

Умножим обе стороны (7) на сферическую функцию

$$Y_{l0}(\theta)^* = Y_{l0}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (8)$$

и проинтегрируем по угловым координатам с учетом ортонормировки

сферических функций,

$$\int d\Omega Y_{lm}^* Y_{l'm'} = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (9)$$

Получаем равенство:

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{ikr \cos\theta} P_l(\cos\theta) = A_l \sqrt{2\pi k^2} \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l+1/2}(kr). \quad (10)$$

Интеграл в (10) можно вычислить методом, аналогичным примененному нами в задаче 6.4. Перейдя к интегрированию по $\eta = \cos\theta$ и обозначив

$$kr = \xi, \quad (11)$$

имеем:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{ikr \cos\theta} P_l(\cos\theta) &= \int_{-1}^1 d\eta e^{i\xi\eta} P_l(\eta) = \hat{P}_l\left(-i\frac{d}{d\xi}\right) \int_{-1}^1 d\eta e^{i\xi\eta} = \\ &= 2\hat{P}_l\left(-i\frac{d}{d\xi}\right) \frac{\sin\xi}{\xi}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $\hat{P}_l(-id/d\xi)$ – дифференциальный оператор, получающийся в результате замены переменной η в выражении для полинома Лежандра $P_l(\eta)$,

$$P_l(\eta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d}{d\eta^l} (\eta^2 - 1)^l,$$

оператором дифференцирования $-id/d\xi$. Непосредственное вычисление для нескольких первых значений l показывает, что

$$\hat{P}_l\left(-i\frac{d}{d\xi}\right) \frac{\sin\xi}{\xi} = i^l \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}} J_{l+1/2}(\xi). \quad (13)$$

С учетом (11)–(13) находим из (10) искомые амплитуды A_l :

$$A_l = i^l \sqrt{\pi(2l+1)} / k. \quad (14)$$

Для величины (6), характеризующей зависимость от l и k вероятности того, что у частицы в состоянии (1) будет обнаружен момент импульса l , имеем:

$$\sigma_l = \frac{\pi}{k^2} (2l+1). \quad (15)$$

Отметим, что при $l \gg 1$ выражение (15) переходит в $\sigma_l \approx 2\pi l/k^2$ и может быть интерпретировано как площадь $2\pi r \Delta r$ кольца радиуса $\rho = \hbar l/p$ шириной $\Delta \rho = \hbar/p$. Величина ρ представляет собой прицельное расстояние, которым определялось бы значение момента импульса $\hbar l$ частицы с импульсом $\hbar k = p$ в классической механике: $\hbar l = \rho p$.

В литературе вместо функций Бесселя полуцелого порядка часто применяют так называемые сферические функции Бесселя j_l :

$$j_l(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}} J_{l+1/2}(\xi) . \quad (16)$$

С учетом определения (16) рассмотренное в данной задаче разложение плоской волны по собственным функциям момента импульса принимает следующий вид:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) . \quad (17)$$

7.7. а) Уровень энергии сферического осциллятора, ближайший к основному энергетическому уровню, трехкратно вырожден. Принадлежащие этому уровню возбужденные состояния осциллятора согласно условию задачи выберем в виде

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = f(r)x , \quad \psi_{010}(\mathbf{r}) = f(r)y , \quad \psi_{001}(\mathbf{r}) = f(r)z , \quad (1)$$

где функция $f(r)$ зависит от координат только через радиальную переменную $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$. Обозначим состояния, описываемые тремя волновыми функциями (1), как $|1\rangle$, $|2\rangle$ и $|3\rangle$, соответственно. Эти векторы состояний нормированы и взаимно ортогональны, поскольку подобными же свойствами обладают волновые функции (1).

Подействуем на функции (1) оператором $\hat{l}_z = -i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x)$. В ходе вычислений можно множитель $f(r)$ выносить из под знака \hat{l}_z , так как в результате действия операторов орбитального момента на функцию, зависящую от координат только через радиальную переменную r , получается нуль. Имеем:

$$\hat{l}_z|1\rangle = i|2\rangle , \quad \hat{l}_z|2\rangle = -i|1\rangle , \quad \hat{l}_z|3\rangle = 0 . \quad (2)$$

Скалярно умножив (2) на каждый из векторов состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, получаем матричное представление для оператора \hat{l}_z в базисе, образованном состояниями $|1\rangle$, $|2\rangle$ и $|3\rangle$:

$$\hat{l}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Аналогичным образом вычисляются матрицы \hat{l}_y и \hat{l}_x :

$$\hat{l}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Диагональные элементы перечисленных матриц равны нулю, следовательно,

$$\langle \mathbf{1} \rangle = 0 \quad (4)$$

для любого из трех состояний (1).

б) Поскольку в результате действия операторов проекций момента на состояния (1) не образуются новые функции, линейно независимые по отношению к (1), можно утверждать, что эти три состояния составляют мультиплет, соответствующий значению орбитального момента $l = 1$ (согласно равенству $2l + 1 = 3$). Такой вывод подтверждается вычислением матрицы квадрата момента:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

В базисе, образованном состояниями с определенной величиной момента l , матрица квадрата момента должна иметь вид $l(l+1)\hat{\mathbf{1}}$, так что из равенства $l(l+1) = 2$ мы вновь получаем значение $l = 1$.

Обратим внимание на совпадение матрицы (3) с матрицей проекции момента (9) в задаче 3.9. Оно говорит нам о том, что рассматриваемые здесь состояния осциллятора (1) можно охарактеризовать как «линейно поляризованные колебания» частицы, преобразующиеся при поворотах вокруг оси z подобно ортам декартовой системы координат. Состояние $|3\rangle$ инвариантно по отношению к таким поворотам и, следовательно, принадлежит равному нулю значению проекции момента $l_z \equiv m$:

$$|3\rangle = |l = 1, m = 0\rangle. \quad (5)$$

Состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ не имеют определенного значения m ; они могут быть записаны в форме линейных комбинаций «циркулярно поляризованных

колебаний» с $m = \pm 1$, то есть – в виде суперпозиции состояний $|l = 1, m = \pm 1\rangle$. В свою очередь, состояния $|l = 1, m = \pm 1\rangle$ можно разложить по базисным векторам $|1\rangle$ и $|2\rangle$ с помощью формул, аналогичных (7) в задаче 7.4:

$$\begin{aligned} |l = 1, m = 1\rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + i|2\rangle), \\ |l = 1, m = -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - i|2\rangle). \end{aligned} \quad (6)$$

Искомая вероятность W_{lm} значений l и m в состояниях $|k\rangle$ (где $k = 1, 2, 3$) равна квадрату модуля амплитуды вероятности $\langle l, m | k \rangle$. Таким образом,

$$\begin{aligned} W_{10} &= 1 \quad \text{в состоянии } |3\rangle, \\ W_{11} &= W_{1,-1} = 1/2 \quad \text{в состояниях } |1\rangle \text{ и } |2\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Вероятности W_{lm} для других значений l и m в рассматриваемых состояниях равны нулю.

Те же результаты легко получить и не обращаясь к решениям предшествующих задач. Например, пользуясь данными о действии операторов \hat{l}_x и \hat{l}_y на базисное состояние $|3\rangle$, можно применить к (5) операторы

$$\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y, \quad \hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y.$$

Такое вычисление с учетом соотношений (XIII) из введения к данной главе при $j = l$ непосредственно ведет к формулам (6). Еще один способ получения (6) заключается в сравнении (1) с явными выражениями для $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ после того как функции (1) будут записаны в сферической системе координат.

7.8. Уравнение Шредингера для частицы массы μ

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} (\varepsilon - U(\mathbf{r}))\psi = 0 \quad (1)$$

с указанным в условии задачи потенциалом запишем в цилиндрической системе координат (см. задачу 4.10):

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\varepsilon + \frac{\alpha}{r} \right) \psi = 0. \quad (2)$$

При двумерном движении частицы в направлениях, перпендикулярных к оси z , волновая функция $\psi(r, \varphi)$ не зависит от координаты z . Если такую функцию искать в виде

$$\psi(r, \varphi) = \frac{\eta(r)}{\sqrt{r}} e^{im\varphi}, \quad (3)$$

то для вспомогательной функции $\eta(r)$ получим следующее уравнение:

$$\frac{d^2\eta}{dr^2} + \left(\frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2} - \frac{m^2 - 1/4}{r^2} + \frac{\mu\alpha}{\hbar^2} \frac{2}{r} \right) \eta = 0. \quad (4)$$

Известно, что уравнение Шредингера (1) с трехмерным кулоновским потенциалом $U = -\alpha/r$ подстановкой $\psi = r^{-1}\chi(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ приводится к виду

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left(\frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{\mu\alpha}{\hbar^2} \frac{2}{r} \right) \chi = 0. \quad (5)$$

При условии ограниченности искомой функции χ уравнение (5) дает «водородоподобный» спектр энергетических уровней:

$$\varepsilon_n = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad (6)$$

где

$$n \equiv n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \dots \quad (7)$$

Заметим, что при замене l на $|m| - 1/2$ уравнение (5) переходит в уравнение (4), интересующее нас в связи с аналогичной двумерной задачей о связанных состояниях. Следовательно, искомые уровни энергии ε можно найти непосредственно по формулам (6) и (7), заменив в (7) величину l на $|m| - 1/2$:

$$\varepsilon_{n_r, m} = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(n_r + |m| + 1/2)^2}. \quad (8)$$

Согласно осцилляционной теореме n_r представляет собой число узлов волновой функции (3) по переменной r и, следовательно, принимает значения $0, 1, 2, \dots$. Спектр значений m определяется условием однозначности волновой функции (3), в силу которого $\psi(r, \varphi)$ по переменной φ должна быть периодической функцией с периодом 2π . Из этого следует, что

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9)$$

Энергетический спектр (8) вырожден: состояния с различными значениями n_r и m , но с одним и тем же значением суммы $n_r + |m|$ имеют одинаковую энергию. Целесообразно, по аналогии с (7), ввести в рассмотрение «главное» квантовое число N , нумерующее различные уровни энергии (8) и принимающее целочисленные значения:

$$N = n_r + |m| + 1 . \quad (10)$$

Тогда (8) окончательно запишется в виде

$$\varepsilon_N = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(N-1/2)^2} , \quad N = 1, 2, 3, \dots . \quad (11)$$

Кратность вырождения энергетического уровня ε_N равна $2N-1$.

Физический смысл квантового числа m виден из того, что при замене $\varphi \rightarrow \varphi - \alpha$, соответствующей действию оператора поворота

$$\hat{R}(\alpha\mathbf{e}_z) = e^{-i\alpha\hat{l}_z}$$

на волновую функцию (3), последняя лишь приобретает фазовый множитель $e^{-i\alpha m}$. Таким образом, волновая функция вида (3) является собственной функцией оператора проекции орбитального момента \hat{l}_z и характеризуется определенным значением $l_z = m$.

Глава 8. СПИН

Спин частицы – это ее собственный момент импульса, непосредственно не связанный с перемещением частицы в \mathbf{r} -пространстве и, следовательно, не выражающийся через координаты и импульс. Частица со спином s может находиться в $2s+1$ спиновых состояниях $|\sigma\rangle$ с определенными значениями проекции спина $s_z \equiv \sigma$,

$$\sigma = s, s-1, \dots, -s. \quad (\text{I})$$

Такие векторы состояния образуют ортонормированный базис в $(2s+1)$ -мерном пространстве спиновых состояний частицы.

Из опыта известно, что для частиц каждого вида величина спина s является неизменной характеристикой наряду с массой и электрическим зарядом. Спин электрона, протона, нейтрона и ряда других микрочастиц равен $1/2$. При $s = 1/2$ (ниже речь идет, в основном, об этом случае) проекция спина σ принимает два противоположных значения, равных по абсолютной величине самому спину. В связи с этим говорят, что электрон может находиться в состоянии со спином вдоль оси z или в состоянии со спином против оси z , и применяют обозначения $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ для состояний $|\sigma = 1/2\rangle, |\sigma = -1/2\rangle$. Однако следует иметь в виду, что отдельно взятой частице невозможно приписать классически понимаемый вектор собственного механического момента \mathbf{s} , так что, в частности, иногда упоминаемой образной «модели» электрона в виде вращающегося волчка нельзя придать точного смысла. Действительно, вследствие некоммутативности операторов проекций спина,

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hat{s}_z, \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hat{s}_x, \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hat{s}_y, \quad (\text{II})$$

электрон с определенной проекцией $s_z = \sigma$ не имеет определенных значений s_y, s_x и, таким образом, не обладает определенным вектором спина \mathbf{s} . Но усредненный по квантовому ансамблю вектор спина $\langle \mathbf{s} \rangle$ имеет четкий смысл – для электрона в любом нормированном спиновом состоянии $|\chi\rangle$,

$$|\chi\rangle = \chi_\uparrow |\uparrow\rangle + \chi_\downarrow |\downarrow\rangle, \quad (\text{III})$$

усредненный вектор спина вычисляется как среднее значение векторного оператора спина:

$$\langle \mathbf{s} \rangle = \langle \chi | \hat{\mathbf{s}} | \chi \rangle, \quad (\text{IV})$$

где

$$\hat{\mathbf{s}} = \mathbf{e}_x \hat{s}_x + \mathbf{e}_y \hat{s}_y + \mathbf{e}_z \hat{s}_z, \quad (\text{V})$$

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_x, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_y, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z, \quad (\text{VI})$$

$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ – матрицы Паули:

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

Указанное матричное представление операторов проекций спина следует из формул (XII) введения к главе 7 при $j = s = 1/2$. В развернутой форме компоненты усредненного вектора спина (IV) даются выражениями:

$$\begin{aligned} \langle s_x \rangle &= (1/2) (\chi_{\uparrow}^* \chi_{\downarrow} + \chi_{\downarrow}^* \chi_{\uparrow}), \\ \langle s_y \rangle &= (-i/2) (\chi_{\uparrow}^* \chi_{\downarrow} - \chi_{\downarrow}^* \chi_{\uparrow}), \\ \langle s_z \rangle &= (1/2) (|\chi_{\uparrow}|^2 - |\chi_{\downarrow}|^2). \end{aligned} \quad (\text{VIII})$$

Величина вектора спина с компонентами (VIII) при учете условия нормировки,

$$|\chi_{\uparrow}|^2 + |\chi_{\downarrow}|^2 = 1, \quad (\text{IX})$$

равна $1/2$, поэтому усредненный вектор спина можно представить в форме

$$\langle \mathbf{s} \rangle = \frac{1}{2} \mathbf{n},$$

где $\mathbf{n} = \langle \chi | \hat{\sigma} | \chi \rangle$ – единичный вектор: $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$. Спиновое состояние $|\chi\rangle$ является состоянием с определенным значением проекции спина на направление \mathbf{n} , равным $s_{\mathbf{n}} = 1/2$; при этом проекция спина на противоположное направление равна $-1/2$. Существование для любого спинового состояния $|\chi\rangle$ такого направления, на которое проекция спина в данном состоянии имеет определенное значение (равное $1/2$), представляет собой характерное свойство спина $s = 1/2$.

Операторы поворотов, действующие на спиновые состояния с $s = 1/2$, в базисе $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$, связанном с осью z , имеют следующий вид:

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_x) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & -i \sin(\alpha/2) \\ -i \sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix},$$

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_y) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & -\sin(\alpha/2) \\ \sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix},$$

$$\hat{R}(\alpha \mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} \exp(-i\alpha/2) & 0 \\ 0 & \exp(i\alpha/2) \end{pmatrix}. \quad (\text{X})$$

Сюда входит угол поворота α , деленный на два, так что при $\alpha = 2\pi$ эти матрицы равны $-\hat{1}$, а не единичной матрице $\hat{1}$. Другими словами, спиновое состояние $|\chi\rangle$ при повороте на угол 2π вокруг любой оси переходит в $-|\chi\rangle$. Поскольку такой закон преобразования существенно отличается от правил преобразования при вращениях обычных векторов, для спинового состояния $|\chi\rangle$ принят специальный термин – *спинор*. В указанной неоднозначности спиноров по отношению к вращениям на угол 2π сказывается тот факт, что спин является внутренней степенью свободы частицы и не описывается волновой функцией в координатном представлении; именно поэтому здесь не возникает требования однозначности, которое в применении к волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ ведет к допустимости лишь целочисленных значений орбитального момента импульса. Можно показать, что при преобразованиях спинора посредством матриц (X) компоненты усредненного вектора спина (VIII) преобразуются как проекции обычного трехмерного вектора.

Спин – одно из наиболее фундаментальных понятий в квантовой теории. Ярким подтверждением тому служит так называемая *связь спина со статистикой*: частицы с полуцелым спином – фермионы, а с целочисленным спином – бозоны. Бозонами называют частицы одного и того же вида (тождественные частицы), подчиняющиеся статистике Бозе–Эйнштейна. Они характеризуются тем, что их квантовые состояния симметричны по отношению к перестановке полных наборов квантовых чисел частиц (или условно вводимых номеров частиц); для двух частиц с квантовыми числами a и b указанное требование симметрии имеет вид:

$$|b, a\rangle = |a, b\rangle. \quad (\text{XI})$$

Фермионами называют тождественные частицы, подчиняющиеся статистике Ферми–Дирака. Они характеризуются тем, что их квантовые состояния антисимметричны:

$$|b, a\rangle = -|a, b\rangle. \quad (\text{XII})$$

Существенное различие статистических свойств бозонов и фермионов состоит уже в том, что бозоны могут находиться в состоянии $|a, a\rangle \neq 0$ с одинаковыми квантовыми числами частиц, тогда как в случае фермионов из (XII) следует, что $|a, a\rangle = -|a, a\rangle$, то есть $|a, a\rangle = 0$. Другими словами, в любой системе тождест-

венных фермионов не могут одновременно находиться в одинаковых состояниях две (или более) частицы; это утверждение называется *принципом Паули*.

Задачи

8.1. Для частицы со спином $1/2$ найти состояния с определенной проекцией спина на ось x , пользуясь базисными спиновыми состояниями с определенными значениями проекции спина на ось z .

8.2. В случае частицы со спином $1/2$ найти: а) состояния с определенной проекцией спина s_y ; б) вероятность различных значений s_x в состояниях с определенным значением s_y .

8.3. Для задания произвольного положения декартовой системы координат $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ относительно первоначальных декартовых осей x, y, z необходимо указать три угла. Определим такие углы следующим образом: пусть θ и φ являются угловыми координатами оси \tilde{z} в сферической системе координат, связанной с x, y, z , а угол γ задает положение осей \tilde{x}, \tilde{y} в плоскости перпендикулярной оси \tilde{z} (см. рис. 8.1).

а) Выписать в спинорном базисе $|s = 1/2, s_z = \pm 1/2\rangle$ матрицу вращения \hat{R} , соответствующую последовательности трех поворотов на углы γ, θ, φ , в результате которых оси x, y, z переходят в $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$.

б) Найти усредненный вектор спина $\langle \mathbf{s} \rangle$ в состоянии, образуемом из состояния со спином вдоль оси z под действием указанного выше вращения \hat{R} .

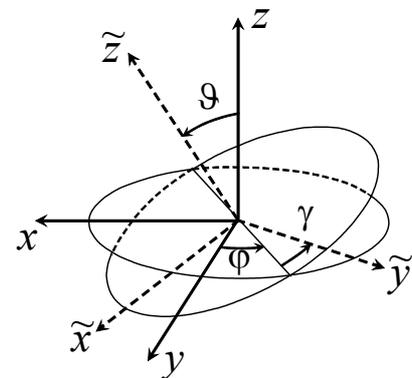


Рис. 8.1

8.4. Гамильтониан частицы с электрическим зарядом q , спином s и спиновым магнитным моментом μ_0 в присутствии магнитного поля \mathbf{B} имеет вид (в нерелятивистской квантовой теории):

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}) - \frac{\mu_0}{s} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B},$$

где $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, m – масса частицы. Оператор \hat{H} этого вида называют *гамильтонианом Паули*. Показать, что в однородном магнитном поле \mathbf{B} допускается раздельное описание орбитальных и спиновых состояний частицы.

8.5. Частица со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ_0 находится в однородном магнитном поле \mathbf{B} . В начальный момент времени спиновое состояние частицы имело вид

$$|\chi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle,$$

где $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ – состояния со спином вдоль и против направления \mathbf{B} , соответственно. Найти:

- Спиновое состояние частицы $|\chi(t)\rangle$ для произвольного момента времени.
- Зависимость от времени усредненного вектора спина.
- Стационарные спиновые состояния частицы.

8.6. Для системы из двух частиц со спином $s_1 = s_2 = 1/2$ найти состояния $|S, S_z\rangle$ с определенными значениями суммарного спина S и проекции суммарного спина S_z ; воспользоваться базисными состояниями вида $|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle$.

8.7. а) Для электрона в состояниях с различными значениями орбитального момента l перечислить возможные состояния с определенным значением полного момента j , представляющего собой квантово-механическую сумму орбитального и спинового моментов электрона. б) Найти собственные значения оператора энергии «спин-орбитального взаимодействия» вида $A\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$, где $A > 0$ – некоторая постоянная с размерностью энергии.

8.8. Оператор энергии взаимодействия магнитных моментов электрона и протона в $1s$ -состоянии атома водорода определяется только спиновыми моментами электрона и атомного ядра (так как орбитальный момент электрона в s -состоянии равен нулю) и может быть записан в виде $C\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2$, где $C > 0$ – постоянная с размерностью энергии, зависящая от значений магнитных моментов электрона и ядра, $\hat{\sigma}_1$ и $\hat{\sigma}_2$ – матрицы Паули, относящиеся к спинам электрона и ядра, соответственно. Найти для указанного оператора собственные значения и собственные состояния.

8.9. Для системы из двух электронов, находящихся в состоянии с суммарным спином $S = 0$, записать орбитальную волновую функцию $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в предположении, что существуют одноэлектронные орбитальные состояния $\varphi_p(\mathbf{r})$ и $\varphi_q(\mathbf{r})$. *Указания:* учесть принцип неразличимости одинаковых частиц

(требование антисимметрии полной волновой функции тождественных фермионов); для системы частиц считать применимым раздельное описание орбитального и спинового состояний.

8.10. Применительно к системе из двух электронов с одночастичными орбитальными состояниями $\varphi_p(\mathbf{r})$ и $\varphi_q(\mathbf{r})$ записать выражение для среднего значения не зависящей от спинов частиц энергии взаимодействия $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ в двух случаях: а) суммарный спин системы $S = 0$, б) суммарный спин системы $S = 1$.

Решения

8.1. Оператор проекции спина на ось x в базисе $|\uparrow_z\rangle, |\downarrow_z\rangle$ имеет вид матрицы

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Состояния $|\chi\rangle$ с определенной проекцией спина s_x должны удовлетворять уравнению

$$\hat{s}_x |\chi\rangle = s_x |\chi\rangle. \quad (2)$$

Записав спинор $|\chi\rangle$ в форме разложения по базисным состояниям с определенной проекцией спина s_z ,

$$|\chi\rangle = \chi_\uparrow |\uparrow_z\rangle + \chi_\downarrow |\downarrow_z\rangle, \quad (3)$$

представим уравнение (2) в виде системы однородных линейных уравнений для неизвестных коэффициентов χ_\uparrow и χ_\downarrow :

$$\begin{cases} -s_x \chi_\uparrow + (1/2) \chi_\downarrow = 0 \\ (1/2) \chi_\uparrow - s_x \chi_\downarrow = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Такая система имеет нетривиальные решения при условии

$$\det(\hat{s}_x - s_x \hat{1}) = 0,$$

то есть

$$s_x^2 - 1/4 = 0. \quad (5)$$

Отсюда мы находим два собственных значения оператора \hat{s}_x ; они являются допустимыми значениями проекции спина на ось x :

$$s_x = 1/2, -1/2. \quad (6)$$

Конечно, этот результат заранее очевиден, так как здесь идет речь о спектре значений проекции момента импульса $(j, j-1, \dots, -j)$ при величине момента $j = s = 1/2$; спектр значений проекции момента не зависит от выбора направления, по отношению к которому определяется рассматриваемая проекция.

Подставив в (4) первое из собственных значений (6), получим: $\chi_\uparrow = \chi_\downarrow$. Это означает, что нормированное на единицу спиновое состояние $|\chi\rangle \equiv |\uparrow_x\rangle$ с проекцией спина $s_x = 1/2$ можно записать в виде:

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow_z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow_z\rangle. \quad (7)$$

Второе собственное значение, $s_x = -1/2$, после подстановки в (4) дает: $\chi_\uparrow = -\chi_\downarrow$. Следовательно, нормированный спинор, принадлежащий этому собственному значению, имеет вид:

$$|\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow_z\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow_z\rangle. \quad (8)$$

Отметим, что спиноры (7) и (8) взаимно ортогональны и могут быть выбраны в качестве новой пары базисных состояний для описания спиновой степени свободы частицы со спином $s = 1/2$. В каждом из этих состояний вероятность обнаружения любого из значений $s_z = \pm 1/2$ составляет 50%. Подобную связь между двумя парами базисных состояний мы обсуждали в задаче 2.5.

8.2. а) В базисе, образованном состояниями с определенной проекцией спина s_z , оператор \hat{s}_y представляется матрицей

$$\hat{s}_y = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Найдя (как в задаче 8.1) собственные значения s_y и нормированные собственные векторы оператора (1), имеем:

$$s_y = 1/2, -1/2; \quad (2)$$

$$\begin{aligned} |\uparrow_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow_z\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|\downarrow_z\rangle, \\ |\downarrow_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow_z\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|\downarrow_z\rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

Состояния (3) можно также получить с помощью поворотов базисного спинора $|\uparrow_z\rangle$ на углы $\pm\pi/2$ вокруг оси x :

$$|\uparrow_y\rangle = \hat{R}\left(-\frac{\pi}{2}\mathbf{e}_x\right)|\uparrow_z\rangle, \quad |\downarrow_y\rangle = \hat{R}\left(\frac{\pi}{2}\mathbf{e}_x\right)|\uparrow_z\rangle. \quad (4)$$

Пользуясь формулами (7) и (8) задачи 8.1, находим вероятности различных значений s_x в состояниях с определенной проекцией s_y :

$$\begin{aligned} |\langle\uparrow_x|\uparrow_y\rangle|^2 &= |(1+i)/2|^2 = 1/2, & |\langle\downarrow_x|\uparrow_y\rangle|^2 &= |(1-i)/2|^2 = 1/2 \\ |\langle\uparrow_x|\downarrow_y\rangle|^2 &= |(1-i)/2|^2 = 1/2, & |\langle\downarrow_x|\downarrow_y\rangle|^2 &= |(1+i)/2|^2 = 1/2. \end{aligned} \quad (5)$$

Вообще, при сравнении двух спиновых состояний (со спином $1/2$) существенным может быть только угол θ между направлениями обоих спинов, потому для вычисления вероятностей достаточно полагать, что второе состояние получено поворотом первого состояния на угол θ вокруг, например, оси y и, следовательно, имеет вид:

$$|\chi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle, \quad (6)$$

где $|\uparrow\rangle$ – первое состояние, $|\downarrow\rangle$ – состояние с противоположным направлением спина. Тогда вероятности «событий» \uparrow и \downarrow в состоянии (6) есть

$$W_{\uparrow} = \cos^2\frac{\theta}{2}, \quad W_{\downarrow} = \sin^2\frac{\theta}{2}. \quad (7)$$

Найденные выше значения вероятностей (5) согласуются с формулами (7).

8.3. а) Из приведенного в условии задачи рисунка можно видеть, что для перевода координатных осей в новое положение $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$, характеризуемое углами γ, θ, φ , следует произвести три поворота координатной системы вокруг первоначальных осей x, y, z : поворот на угол γ вокруг оси z , затем – на угол θ вокруг оси y , и, наконец, – на угол φ снова вокруг оси z . Перемножив в

соответствии с указанной последовательностью вращений спинорные матрицы поворотов, получим искомую матрицу \hat{R} :

$$\hat{R} = \hat{R}(\varphi \mathbf{e}_z) \hat{R}(\theta \mathbf{e}_y) \hat{R}(\gamma \mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} e^{-i(\varphi+\gamma)/2} \cos \frac{\theta}{2} & -e^{-i(\varphi-\gamma)/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i(\varphi-\gamma)/2} \sin \frac{\theta}{2} & e^{i(\varphi+\gamma)/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

б) Обозначим базисные состояния $|s=1/2, s_z = \pm 1/2\rangle$ как $|\uparrow_z\rangle$, $|\downarrow_z\rangle$. Элементы первого столбца матрицы (1) представляют собой компоненты спинора $\hat{R}|\uparrow_z\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \uparrow_z | \hat{R} | \uparrow_z \rangle &= e^{-i(\varphi+\gamma)/2} \cos(\theta/2), \\ \langle \downarrow_z | \hat{R} | \uparrow_z \rangle &= e^{i(\varphi-\gamma)/2} \sin(\theta/2). \end{aligned} \quad (2)$$

Такой спинор, очевидно, должен описывать спиновое состояние $|\uparrow_{\tilde{z}}\rangle$ со спином вдоль оси \tilde{z} , поскольку рассматриваемый поворот преобразует направление оси z в направление \tilde{z} . В этом состоянии усредненный вектор спина будет иметь направление оси \tilde{z} . Проверим справедливость данных утверждений непосредственным вычислением компонент усредненного вектора спина.

Так как в квантовой механике два вектора состояния, различающиеся лишь фазовым множителем, описывают одно и то же состояние физического объекта, упростим выражения (2), рассматривая вместо $\hat{R}|\uparrow_z\rangle$ физически эквивалентный спинор

$$|\chi\rangle = e^{i(\varphi+\gamma)/2} \hat{R}|\uparrow_z\rangle. \quad (3)$$

Его компоненты имеют вид:

$$\chi_{\uparrow} = \cos(\theta/2), \quad \chi_{\downarrow} = e^{i\varphi} \sin(\theta/2). \quad (4)$$

Произведя с использованием (4) вычисление проекций усредненного вектора спина по формулам (VIII) введения к данной главы, получим

$$\langle s_x \rangle = \frac{1}{2} \sin \theta \cos \varphi, \quad \langle s_y \rangle = \frac{1}{2} \sin \theta \sin \varphi, \quad \langle s_z \rangle = \frac{1}{2} \cos \theta. \quad (5)$$

Видно, что величина вектора $\langle \mathbf{s} \rangle$ равна $1/2$, а направление по отношению к осям x, y, z характеризуется теми же углами, что и направление оси \tilde{z} .

Отметим также, что квадраты модулей величин (4) или (2) имеют смысл соответствующих вероятностей; они, как и должно быть, совпадают с вероятностями (7) в задаче 8.2.

8.4. Гамильтониан Паули представляется суммой двух операторов:

$$\hat{H} = \hat{H}_{orb} + \hat{H}_{cn} , \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_{orb} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}) , \quad (2)$$

$$\hat{H}_{cn} = -\frac{\mu_0}{s} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{B}} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_{cn} \cdot \mathbf{B} . \quad (3)$$

Пусть вектор спинового состояния $|\chi_{cn}\rangle$ удовлетворяет волновому уравнению Шредингера со спиновой частью полного гамильтониана:

$$i\hbar \frac{\partial |\chi_{cn}\rangle}{\partial t} = \hat{H}_{cn} |\chi_{cn}\rangle . \quad (4)$$

В случае однородного магнитного поля \mathbf{B} (может быть зависящего от времени) уравнение (4) не содержит координат \mathbf{r} и поэтому решение этого уравнения $|\chi_{cn}\rangle$ по отношению к координатным переменным и орбитальной части гамильтониана \hat{H}_{orb} допустимо считать постоянной величиной. В свою очередь, вектор орбитального состояния частицы $|\psi_{orb}\rangle$, удовлетворяющий уравнению

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_{orb}\rangle}{\partial t} = \hat{H}_{orb} |\psi_{orb}\rangle , \quad (5)$$

можно считать постоянной величиной по отношению к оператору \hat{H}_{cn} , то есть можно рассматривать $|\psi_{orb}\rangle$ как величину, не принадлежащую пространству спиновых состояний. Тогда результат действия гамильтониана Паули на вектор состояния вида

$$|\Phi\rangle = |\psi_{orb}\rangle \otimes |\chi_{cn}\rangle \quad (6)$$

запишется в форме

$$\hat{H} |\Phi\rangle = (\hat{H}_{orb} |\psi_{orb}\rangle) \otimes |\chi_{cn}\rangle + |\psi_{orb}\rangle \otimes \hat{H}_{cn} |\chi_{cn}\rangle . \quad (7)$$

Учитывая формулу

$$\frac{\partial}{\partial t}(|\psi_{op\bar{o}}\rangle \otimes |\chi_{cn}\rangle) = \frac{\partial|\psi_{op\bar{o}}\rangle}{\partial t} \otimes |\chi_{cn}\rangle + |\psi_{op\bar{o}}\rangle \otimes \frac{\partial|\chi_{cn}\rangle}{\partial t} \quad (8)$$

и равенства (4), (5), (7), заключаем, что состояние (6) удовлетворяет волновому уравнению Шредингера с гамильтонианом Паули:

$$i\hbar \frac{\partial|\Phi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Phi\rangle .$$

Следовательно, описание состояний частицы в форме (6) является допустимым.

Перейдя на язык волновых функций, можно убедиться, что в указанном описании координатные и спиновые переменные полностью разделены. С этой целью введем в рассмотрение базисные состояния частицы $|\xi\rangle$, соответствующие определенным координатам \mathbf{r} и определенным значениям проекции спина $s_z \equiv \sigma$:

$$|\xi\rangle = |\mathbf{r}\rangle \otimes |\sigma\rangle . \quad (9)$$

Скалярно умножив (6) на (9), получим:

$$\langle \xi | \Phi(t) \rangle = \langle \mathbf{r} | \psi_{op\bar{o}}(t) \rangle \langle \sigma | \chi_{cn}(t) \rangle , \quad (10)$$

или

$$\Phi(\xi, t) = \psi(\mathbf{r}, t) \chi_{\sigma}(t) . \quad (11)$$

Здесь ξ означает совокупность переменных \mathbf{r}, σ , так что $\Phi(\xi, t)$ представляет собой волновую функцию, квадратом модуля которой определяется одновременно вероятность значений \mathbf{r} и проекции спина частицы σ . Вероятность найти частицу в элементе объема dV с координатами \mathbf{r} и при этом обнаружить у частицы значение проекции спина $s_z = \sigma$ есть

$$W_{\mathbf{r}, \sigma} = dV |\Phi(\xi, t)|^2 .$$

Поскольку волновая функция (11) имеет вид произведения орбитальной и спиновой функций, плотность вероятности координат $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ и распределение вероятности $|\chi_{\sigma}(t)|^2$ для проекции спина в данном случае не связаны друг с другом.

При $\mathbf{V} = 0$ из уравнения (4) следует, что спиновая часть вектора состояния не меняется со временем и ее роль может выполнять, в частности, любое из базисных спиновых состояний $|\sigma\rangle$. Пусть для определенности речь

идет о частице со спином $1/2$, например, – об электроне в атоме. В качестве орбитальных состояний обычно рассматриваются стационарные состояния электрона $|n\rangle$ (это понятие может быть с некоторой степенью точности определено даже в многоэлектронном атоме, несмотря на существенную роль кулоновского взаимодействия между всеми электронами); n – совокупность квантовых чисел стационарного состояния без учета спина. Тогда полный вектор состояния частицы, выступающий в данном контексте как вектор базисного состояния электрона, запишется согласно (6) в виде

$$|\Phi_{n,\sigma}\rangle = |n\rangle \otimes |\sigma\rangle .$$

Если скалярно умножить обе стороны этого равенства на $|\mathbf{r}\rangle$, то получим символическое выражение

$$\Phi_{n,\sigma}(\mathbf{r}) = \psi_n(\mathbf{r}) \otimes |\sigma\rangle ,$$

обозначающее стационарное состояние электрона с орбитальной волновой функцией $\psi_n(\mathbf{r})$ и определенной проекцией спина σ . Такие выражения при $\sigma = 1/2, -1/2$ в литературе иногда записываются как

$$\psi_n(\mathbf{r}) \alpha , \quad \psi_n(\mathbf{r}) \beta .$$

Следует однако помнить, что при этом величины α и β не принимают числовых значений, а лишь символизируют спиновые состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$.

В общем случае, при наличии неоднородного магнитного поля $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, решение $|\Phi(t)\rangle$ волнового уравнения Шредингера с гамильтонианом Паули также может быть разложено по базисным состояниям (9):

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\sigma} \Phi_{\mathbf{r},\sigma}(t) |\mathbf{r}\rangle \otimes |\sigma\rangle .$$

Но амплитуда вероятности $\Phi_{\mathbf{r},\sigma}(t)$ или, что практически то же самое, волновая функция $\Phi(\mathbf{r}, \sigma; t)$ уже не сводится к произведению (11), поскольку имеющаяся в общем случае корреляция значений \mathbf{r} и σ проявляется в том, что различным значениям σ отвечают разные формы зависимости волновой функции от \mathbf{r} . Можно сказать, что волновая функция частицы со спином s имеет $2s+1$ компонент:

$$\Phi(\mathbf{r}, s; t) , \quad \Phi(\mathbf{r}, s-1; t) , \quad \dots , \quad \Phi(\mathbf{r}, -s; t) .$$

Пример подобной корреляции дает картина, соответствующая опыту Штерна–Герлаха с частицами спина $1/2$. В начальный момент времени, до

вхождения волнового пакета в прибор с неоднородным магнитным полем, еще допустимо считать координатную часть волновой функции величиной, не зависящей от спинового состояния частицы. Однако затем в результате взаимодействия с неоднородным магнитным полем образуются два пространственно разнесенных «облака вероятности»: в зависимости от значения проекции спина $\sigma = \pm 1/2$ частица будет обнаруживаться либо в одной либо в другой области \mathbf{r} -пространства.

8.5. а) Воспользуемся отдельным описанием орбитальных и спиновых переменных, обсуждавшимся в задаче 8.4. Для частицы со спином $s = 1/2$ имеем $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$, так что спиновая часть гамильтониана есть

$$\hat{H}_{cn} = -\mu_0 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B} . \quad (1)$$

Направим ось z вдоль магнитного поля; тогда

$$\hat{H}_{cn} = -\mu_0 B \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} -\mu_0 B & 0 \\ 0 & \mu_0 B \end{pmatrix} . \quad (2)$$

Решение $|\chi(t)\rangle$ уравнения

$$i\hbar \frac{\partial |\chi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_{cn} |\chi(t)\rangle \quad (3)$$

с не зависящим от времени магнитным полем следует искать в виде

$$|\chi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_{cn}t/\hbar} |\chi(0)\rangle . \quad (4)$$

Подставив в (4) явное выражение для начального спинового состояния,

$$|\chi(0)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle , \quad (5)$$

получим

$$|\chi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\hat{H}_{cn}t/\hbar} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\hat{H}_{cn}t/\hbar} |\downarrow\rangle . \quad (6)$$

Поскольку базисные спиновые состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ являются собственными для оператора (2),

$$\hat{H}_{cn} |\uparrow\rangle = -\mu_0 B |\uparrow\rangle , \quad \hat{H}_{cn} |\downarrow\rangle = \mu_0 B |\downarrow\rangle , \quad (7)$$

то

$$e^{-i\hat{H}_{cn}t/\hbar}|\uparrow\rangle = e^{i\mu_0 Bt/\hbar}|\uparrow\rangle, \quad e^{-i\hat{H}_{cn}t/\hbar}|\downarrow\rangle = e^{-i\mu_0 Bt/\hbar}|\downarrow\rangle. \quad (8)$$

Таким образом,

$$|\chi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2} e^{i\mu_0 Bt/\hbar}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{-i\mu_0 Bt/\hbar}|\downarrow\rangle. \quad (9)$$

б) При вычислении средних значений проекций спина можно воспользоваться как вектором состояния (9), так и любым вектором состояния, отличающимся от (9) произвольным фазовым множителем. В частности, удобно взять вектор состояния $e^{-i\mu_0 Bt/\hbar}|\chi(t)\rangle$; такой спинор обладает компонентами

$$\chi_{\uparrow} = \cos(\theta/2), \quad \chi_{\downarrow} = e^{i\varphi(t)} \sin(\theta/2), \quad (10)$$

где

$$\varphi(t) = -\frac{2\mu_0 B}{\hbar}t. \quad (11)$$

Согласно результату задачи 8.3 в указанном здесь спиновом состоянии направление усредненного вектора спина $\langle \mathbf{s}(t) \rangle$ по отношению к осям x, y, z определяется углами θ и $\varphi(t)$. Поскольку угол $\varphi(t)$ изменяется со скоростью

$$\omega = \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{2\mu_0 B}{\hbar}, \quad (12)$$

мы заключаем, что вектор $\langle \mathbf{s}(t) \rangle$ прецессирует (вращается) вокруг направления \mathbf{B} с частотой (12). При этом угол между направлениями $\langle \mathbf{s}(t) \rangle$ и \mathbf{B} имеет постоянное значение, равное θ ; оно определяется начальным условием.

При $\theta = 0$ спиновое состояние (9) является стационарным, это есть состояние со спином вдоль \mathbf{B} . Ему отвечает собственное значение оператора \hat{H}_{cn}

$$\varepsilon_{\uparrow} = -\mu_0 B. \quad (13)$$

При $\theta = \pi$ спиновое состояние частицы также оказывается стационарным – это будет состояние со спином в направлении, противоположном \mathbf{B} , принадлежащее уровню энергии

$$\varepsilon_{\downarrow} = \mu_0 B. \quad (14)$$

Частота прецессии спина (12) соответствует разности значений энергии (13) и (14).

Отметим, что спиновый магнитный момент электрона ($\mu_0 \equiv \mu_e$) есть величина отрицательная. По абсолютной величине спиновый магнитный момент электрона приблизительно равен (с точностью 0.1%) магнетону Бора: $\mu_e \approx -(1.00116) |e| \hbar / 2mc$.

8.6. Спиновые состояния $|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle$ являются собственными векторами для оператора проекции суммарного спина $\hat{S}_z = \hat{s}_{z1} + \hat{s}_{z2}$ с собственными значениями $S_z = \sigma_1 + \sigma_2$:

$$\begin{aligned} (\hat{s}_{z1} + \hat{s}_{z2}) (|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle) &= (\hat{s}_{z1} |\sigma_1\rangle) \otimes |\sigma_2\rangle + |\sigma_1\rangle \otimes \hat{s}_{z2} |\sigma_2\rangle = \\ &= \sigma_1 |\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle + |\sigma_1\rangle \otimes \sigma_2 |\sigma_2\rangle = (\sigma_1 + \sigma_2) (|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle). \end{aligned} \quad (1)$$

Однако для оператора квадрата суммарного спина,

$$\hat{S}^2 = (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2 = \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2, \quad (2)$$

не все из рассматриваемых базисных состояний будут собственными векторами, хотя для $\hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2$ все они являются собственными векторами с собственным значением

$$s_1(s_1 + 1) + s_2(s_2 + 1) = 3/2.$$

Для того чтобы найти собственные векторы оператора (2), построим и диагонализуем матрицу $\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 = 4\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$.

Пронумеруем базисные состояния, например, следующим образом:

$$|1\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2, \quad |2\rangle = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, \quad |3\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, \quad |4\rangle = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2. \quad (3)$$

Пользуясь известными значениями элементов матриц Паули, имеем:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_{x1} \hat{\sigma}_{x2} |1\rangle &= \hat{\sigma}_x |\uparrow\rangle_1 \otimes \hat{\sigma}_x |\downarrow\rangle_2 = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 = |2\rangle, \\ \hat{\sigma}_{y1} \hat{\sigma}_{y2} |1\rangle &= \hat{\sigma}_y |\uparrow\rangle_1 \otimes \hat{\sigma}_y |\downarrow\rangle_2 = -i |\downarrow\rangle_1 \otimes i |\uparrow\rangle_2 = |2\rangle, \\ \hat{\sigma}_{z1} \hat{\sigma}_{z2} |1\rangle &= \hat{\sigma}_z |\uparrow\rangle_1 \otimes \hat{\sigma}_z |\downarrow\rangle_2 = |\uparrow\rangle_1 \otimes (-1) |\downarrow\rangle_2 = -|1\rangle. \end{aligned}$$

Суммируя эти равенства и учитывая, что

$$\hat{\sigma}_{x1} \hat{\sigma}_{x2} + \hat{\sigma}_{y1} \hat{\sigma}_{y2} + \hat{\sigma}_{z1} \hat{\sigma}_{z2} = \hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2,$$

получаем

$$\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 |1\rangle = 2|2\rangle - |1\rangle. \quad (4)$$

Аналогично вычисляется результат действия оператора $\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2$ на остальные три состояния (3):

$$\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 |2\rangle = 2|1\rangle - |2\rangle, \quad (5)$$

$$\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 |3\rangle = |3\rangle, \quad (6)$$

$$\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 |4\rangle = |4\rangle. \quad (7)$$

Скалярно умножив (4)–(7) на каждое из базисных состояний (3), получаем искомую матрицу:

$$\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

«Блочно-диагональный» вид матрицы (8) соответствует тому обстоятельству, что состояния $|3\rangle$ и $|4\rangle$, как видно из (6) и (7), уже являются собственными векторами оператора (8) с собственным значением 1. Следовательно, для определения остальных двух собственных векторов достаточно диагонализировать только верхний блок в (8), относящийся к двумерному подпространству спиновых состояний с базисом $|1\rangle$, $|2\rangle$. Из уравнения

$$\det \begin{pmatrix} -1-\lambda & 2 \\ 2 & -1-\lambda \end{pmatrix} = 0 \quad (9)$$

находим собственные значения: $\lambda = 1$ и $\lambda = -3$. Им отвечают нормированные собственные векторы

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle), \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle). \quad (10)$$

Таким образом, для системы из двух частиц со спином $1/2$ оператор (2) имеет трехкратно вырожденное собственное значение $S(S+1) = 2$ и невырожденное собственное значение $S(S+1) = 0$. Этим собственным значениям соответствуют три состояния с суммарным спином $S = 1$ и синглетное состояние с суммарным спином $S = 0$:

$$\left\{ \begin{array}{l} |S=1, S_z=1\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \\ |S=1, S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \\ |S=1, S_z=-1\rangle = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 \end{array} \right. \quad (11)$$

$$|S=0, S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2. \quad (12)$$

Значительно более быстрые способы решения подобных задач основываются на использовании закона сложения моментов. Для двух произвольных значений спина s_1 и s_2 закон сложения моментов гласит, что суммарный спин S должен с шагом, равным -1 , пробегать все значения от $s_1 + s_2$ до $|s_1 - s_2|$. Применительно к $s_1 = s_2 = 1/2$ мы, таким образом, немедленно находим допустимые значения суммарного спина: $S = 1, 0$. Спектр допустимых значений S_z в каждом из двух мультиплетов с определенным значением S заранее известен, так что можно сразу же указать на принадлежность состояний $|3\rangle$ и $|4\rangle$ триплету с $S = 1$. Недостающее состояние триплета, принадлежащее значению $S_z = 0$, легко получить, применяя повышающий оператор

$$\hat{S}_+ = \hat{s}_{+1} + \hat{s}_{+2} \quad (13)$$

к вектору состояния $|4\rangle = |S=1, S_z=-1\rangle$:

$$\hat{S}_+ |1, -1\rangle = (\hat{s}_+ |\downarrow\rangle_1) \otimes |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 \otimes \hat{s}_+ |\downarrow\rangle_2. \quad (14)$$

Действие повышающего оператора характеризуется формулой

$$\hat{s}_+ |s, s_z\rangle = \sqrt{(s - s_z)(s + s_z + 1)} |s, s_z + 1\rangle. \quad (15)$$

С учетом этой формулы левая сторона соотношения (14) равна $\sqrt{2}|1,0\rangle$, а правая сторона представляет собой сумму $|1\rangle + |2\rangle$. Следовательно, мы приходим к результату (11). Явный вид состояния (12) определяется из условия его ортогональности состоянию $|1,0\rangle$.

8.7. а) Согласно квантово-механическому закону сложения моментов сумма j орбитального момента l и спина s с шагом -1 принимает значения от $l+s$ до $|l-s|$. При $s = 1/2$ это правило дает два допустимых значения полного момента j для каждого заданного значения $l \geq 1$:

$$j = l \pm 1/2 . \quad (1)$$

Для $l = 0$ имеется одно значение полного момента: $j = 1/2$.

Число состояний вида $|l, l_z\rangle \otimes |s = 1/2, s_z\rangle$ с заданным l равно $2(2l+1)$. Из линейных комбинаций таких состояний образуются мультиплеты состояний $|j, m\rangle$ с определенными значениями j, m, l (и $s = 1/2$). Мультиплет с заданным j включает $2j+1$ членов. Указанные мультиплеты условимся обозначать символом орбитального момента электрона (s, p, d, \dots) с нижним индексом, равным полному моменту j . Тогда перечисление электронных состояний представится в следующем виде.

Два s -состояния ($l = 0$) с различающимися значениями проекции спина образуют дублет $s_{1/2}$ с $j = 1/2$. Шесть p -состояний ($l = 1$) образуют дублет $p_{1/2}$ с $j = 1/2$ и квартет $p_{3/2}$ с $j = 3/2$. Десять d -состояний аналогичным образом «расщепляются» на четыре состояния $d_{3/2}$ и шесть состояний $d_{5/2}$. И так далее.

б) В силу соотношения

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}})^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{s}}^2 + 2\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \quad (2)$$

для оператора

$$2\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2 \quad (3)$$

собственными векторами являются состояния с определенными значениями j, l, s . Как раз такие состояния были перечислены выше. Собственные значения оператора (3) при $s = 1/2$ и $j = l \pm 1/2$ равны величине

$$j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) = \begin{cases} l, & j = l + 1/2; \\ -l-1, & j = l - 1/2. \end{cases} \quad (4)$$

Соответственно, при $s = 1/2$ оператор «спин-орбитального взаимодействия» $A\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ имеет два собственных значения $\delta\varepsilon_j$, которые относятся к мультиплетам состояний с различными значениями полного момента j :

$$\delta\varepsilon_{j=l+1/2} = Al/2, \quad \delta\varepsilon_{j=l-1/2} = -A(l+1)/2. \quad (5)$$

При $l = 0$ имеется лишь один мультиплет – дублет состояний $s_{1/2}$ с $j = 1/2$; оба состояния в нем обладают одной и той же энергией.

Эти результаты отражают некоторые черты достаточно сложной теории энергетических уровней атома водорода, основанной на релятивистском описании движения электрона с помощью уравнения Дирака. Энергия спин-орбитального взаимодействия появляется в такой теории как одна из релятивистских поправок. В результате учета релятивистских поправок в энергетическом спектре атома возникает так называемая *тонкая структура* уровней – расщепление энергетических уровней ε_n с различными значениями полного момента j . Порядок величины этого расщепления оценивается выражением $A \sim \alpha^2 Ry$, где $\alpha = e^2 / \hbar c$ – постоянная тонкой структуры.

Дальнейшее уточнение картины уровней атома водорода связано с *радиационными поправками*, возникающими вследствие квантования электромагнитного поля, и, кроме того, – с учетом магнитного поля, создаваемого спиновым магнитным моментом ядра. Взаимодействие электрона с магнитным полем ядра приводит к возникновению так называемой *сверхтонкой структуры* энергетических уровней. В частности, это взаимодействие ответственно за расщепление электронного уровня $1s_{1/2}$ на два близких по энергии подуровня, что следует рассматривать как существенный эффект в тех случаях, когда речь идет о точной картине основного и ближайшего к нему возбужденного состояний атома водорода (см. задачу 8.8).

8.8. Указанный в условии задачи оператор энергии взаимодействия магнитных моментов электрона и протона можно записать в виде

$$C \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 = 4C \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 . \quad (1)$$

Согласно закону сложения моментов допустимые значения суммарного спина электрона и протона S равны 1 и 0, причем состояния с определенным значением S являются собственными для оператора (1), так как

$$2 \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 = \hat{S}^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2 . \quad (2)$$

Собственные значения оператора (2) при $s_1 = s_2 = 1/2$ равны величине

$$S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1) = \begin{cases} 1/2, & S=1; \\ -3/2, & S=0. \end{cases} \quad (3)$$

Триплет спиновых состояний (со спином $S=1$) электрона и ядра, рассматриваемых в качестве единой спиновой подсистемы атома, принадлежит собственному значению энергии взаимодействия C , а синглет ($S=0$)

соответствует собственному значению $-3C$. Таким образом, уровень энергии $1s$ -состояния атома водорода имеет сверхтонкую структуру – испытывает расщепление на два уровня, разделенных энергетическим интервалом $4C$.

Оценим масштаб величины C как значение энергии взаимодействия магнитного момента электрона $\mu_e = -\mu_B$ с магнитным полем $B = \mu_p / r^3 \sim \mu_p / a_B^3$, создаваемым магнитным полем протона на расстояниях от ядра порядка размера электронной «орбиты»; получаем:

$$C \sim \mu_B B \sim \frac{\mu_B \mu_p}{a_B^3} \sim \frac{\mu_B^2}{a_B^3} \frac{m_e}{m_p} \sim \alpha^2 R_y \frac{m_e}{m_p}, \quad (4)$$

где $\alpha = e^2 / \hbar c \approx 1/137$ – постоянная тонкой структуры, $m_e / m_p \sim 5 \cdot 10^{-4}$ – отношение массы электрона к массе протона.

Удается также провести точное квантово-механическое вычисление энергии сверхтонкого расщепления $1s$ -уровня атома водорода (см., например, [8]). Результаты расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными. В единицах частоты это расщепление составляет 1420 МГц, что соответствует электромагнитному излучению с длиной волны 21 см. Наблюдение такого излучения сыграло важную роль в становлении радиоастрономии; по наблюдаемой интенсивности приходящего из космоса излучения на длине волны 21 см и его доплеровскому сдвигу были изучены распределения плотности и скорости движения водорода в Галактике.

8.9. Система двух электронов, находящихся в синглетном спиновом состоянии $|S = 0, S_z = 0\rangle$, в координатном представлении для орбитальной части полного вектора состояния описывается символическим равенством

$$|\Phi_{12}\rangle = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |S = 0, S_z = 0\rangle, \quad (1)$$

где двухэлектронная волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ должна быть выражена через одноэлектронные функции $\varphi_p(\mathbf{r})$, $\varphi_q(\mathbf{r})$, а вектор спинового состояния имеет вид:

$$|S = 0, S_z = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2. \quad (2)$$

Электроны являются фермионами и потому, в соответствии с принципом неразличимости одинаковых частиц, состояние (1) должно быть антисимметричным по отношению к перестановке номеров частиц 1 и 2 (или – по отношению к перестановке совокупностей квантовых чисел каждой из

частиц, например $a = (p, \uparrow)$ и $b = (q, \downarrow)$). Поскольку спиновое состояние (2) уже антисимметрично по номерам 1 и 2, то орбитальная часть в (1) должна быть симметричной:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) . \quad (3)$$

В случае различных частиц 1 и 2 (например, электрона и протона), находящихся в состояниях $\varphi_p(\mathbf{r}_1)$ и $\varphi_q(\mathbf{r}_2)$, орбитальная волновая функция системы имела бы вид произведения $\varphi_p(\mathbf{r}_1) \varphi_q(\mathbf{r}_2)$. Для системы же одинаковых частиц при условии (3) орбитальная волновая функция должна быть равна симметризованному «произведению» одночастичных функций:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_p(\mathbf{r}_1) \varphi_q(\mathbf{r}_2) + \varphi_p(\mathbf{r}_2) \varphi_q(\mathbf{r}_1) \right) . \quad (4)$$

Множитель $1/\sqrt{2}$ здесь введен для сохранения нормировки – если функции φ_p и φ_q нормированы на единицу, то функция (4) также удовлетворяет условию нормировки на единицу:

$$\int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 = 1 . \quad (5)$$

8.10. а) Среднее значение энергии взаимодействия частиц $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$ в состоянии с определенным суммарным спином S ,

$$|\Phi_{12}\rangle = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |S\rangle , \quad (1)$$

с учетом нормировки спинового состояния на единицу имеет вид интеграла по координатам частиц:

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \langle \Phi_{12} | \hat{U} | \Phi_{12} \rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \psi^* U \psi \langle S | S \rangle = \\ &= \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) . \end{aligned} \quad (2)$$

Суммарному спину $S = 0$ отвечает симметричная по номерам частиц 1,2 орбитальная часть волновой функции системы (так как электроны являются фермионами, а спиновая часть состояния системы при $S = 0$ уже антисимметрична):

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_p(\mathbf{r}_1) \varphi_q(\mathbf{r}_2) + \varphi_p(\mathbf{r}_2) \varphi_q(\mathbf{r}_1) \right) . \quad (3)$$

Подставив (3) в (2) и произведя в некоторых слагаемых замену переменных

интегрирования $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$, получим

$$\langle U \rangle = A + J, \quad (4)$$

где

$$A = \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 |\varphi_p(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_q(\mathbf{r}_2)|^2 U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (5)$$

$$J = \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \varphi_p(\mathbf{r}_1)^* \varphi_q(\mathbf{r}_1) \varphi_q(\mathbf{r}_2)^* \varphi_p(\mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (6)$$

Величина $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ представляет собой энергию кулоновского

взаимодействия электронов: $U = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$.

б) Спиновое состояние $|S\rangle$ системы двух электронов при суммарном спине $S=1$ может совпадать с одним из состояний триплета $|S=1, S_z\rangle$ или иметь вид их линейной комбинации. В любом из этих случаев состояние $|S=1\rangle$ симметрично по номерам частиц 1 и 2, так как такой симметрией обладает каждый из членов триплета (см. формулы (11) в задаче 8.6). Следовательно, требованию антисимметрии двухфермионного состояния $|\Phi_{12}\rangle$ теперь отвечает антисимметризованное произведение орбитальных функций φ_p и φ_q :

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_p(\mathbf{r}_1) \varphi_q(\mathbf{r}_2) - \varphi_p(\mathbf{r}_2) \varphi_q(\mathbf{r}_1)). \quad (7)$$

Подставив (7) в (2), получим

$$\langle U \rangle = A - J, \quad (8)$$

где величины A и J даются формулами (5), (6). Как видим, слагаемое J входит в (4) и в (8) с различным знаком.

Величину J называют *обменным* интегралом, а о том обстоятельстве, что энергия системы одинаковых частиц $\langle U \rangle$ зависит от значения суммарного спина (даже при не зависящем от спина частиц операторе взаимодействия U), говорят как об *обменном взаимодействии*. В случае различимых частиц орбитальная часть волновой функции системы была бы равна обычному произведению $\varphi_p(\mathbf{r}_1) \varphi_q(\mathbf{r}_2)$, и вместо (4) или (8) мы имели бы соотношение $\langle U \rangle = A$, не содержащее обменного интеграла.

Глава 9. ВОЗМУЩЕНИЕ, ПЕРЕХОДЫ.

Для приближенного решения сложных квантово-механических задач применяют методы теории возмущений. В теории возмущений гамильтониан системы \hat{H} представляется в форме

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} , \quad (I)$$

где \hat{H}_0 соответствует уравнению Шредингера, допускающему точное решение, а оператор \hat{V} , называемый *возмущением*, рассматривается как малая величина по отношению к \hat{H}_0 .

Различают стационарные и нестационарные задачи. В стационарном случае операторы \hat{H}_0 и \hat{V} не зависят от времени, так что квантовая система с гамильтонианом (I) обладает стационарными состояниями $|\varepsilon_n\rangle$ и соответствующим энергетическим спектром ε_n . Эти векторы состояний и уровни энергии (в дискретной части энергетического спектра) записываются в виде рядов по степеням малого параметра, определяющего малость оператора возмущения \hat{V} по отношению к невозмущенному гамильтониану \hat{H}_0 ; степень малости членов ряда теории возмущений принято указывать вверху в скобках:

$$|\varepsilon_n\rangle = \sum_k C_{kn} |k\rangle^{(0)} , \quad C_{kn} = C_{kn}^{(0)} + C_{kn}^{(1)} + C_{kn}^{(2)} + \dots ; \quad (II)$$

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)} + \dots . \quad (III)$$

Как правило, в важных для практики задачах ряды теории возмущений просуммировать не удастся. В связи с этим основной интерес представляет отыскание лишь нескольких первых членов ряда. Если эти члены малы по сравнению с соответствующими величинами нулевого порядка и последовательно убывают, то их можно трактовать как поправки, обусловленные оператором возмущения. Иногда прибегают к выборочному суммированию рядов или к перестройке ряда по степеням нового малого параметра, но в нашем изложении подобные вопросы не будут затронуты.

Уравнение Шредингера с гамильтонианом (I), определяющее стационарные состояния (II) и уровни энергии (III), сводится к системе уравнений для коэффициентов C_{kn} разложения искомого точного вектора состояния $|\varepsilon_n\rangle$ по собственным векторам $|k\rangle^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана:

$$(\varepsilon_n - \varepsilon_k^{(0)}) C_{kn} = \sum_{k'} V_{kk'} C_{k'n} , \quad (IV)$$

где $V_{kk'}$ – матричные элементы оператора возмущения, вычисленные в базисе $|k\rangle^{(0)}$. В результате подстановки в (IV) величин C_{kn} и ε_n в форме рядов теории возмущений и приравнивания друг другу величин одного и того же порядка малости из левой и правой частей (IV) определяются искомые поправки $C_{kn}^{(m)}$ и $\varepsilon_n^{(m)}$. При этом формулы для случаев, в которых невозмущенный уровень $\varepsilon_n^{(0)}$ не вырожден, существенно отличаются от соответствующих результатов в случаях с вырождением.

В отсутствие вырождения уровня $\varepsilon_n^{(0)}$ коэффициенты, которыми определяются поправки первого приближения к собственным функциям гамильтониана, даются формулами:

$$C_{kn}^{(0)} = \delta_{kn}, \quad C_{nn}^{(1)} = 0, \quad C_{kn}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}} \quad \text{при } k \neq n. \quad (\text{V})$$

Поправки первого и второго порядка к невырожденному уровню энергии $\varepsilon_n^{(0)}$ имеют вид:

$$\varepsilon_n^{(1)} = V_{nn}, \quad (\text{VI})$$

$$\varepsilon_n^{(2)} = \sum_k' \frac{|V_{nk}|^2}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}}, \quad (\text{VII})$$

где штрих у знака суммы означает, что слагаемое с $k = n$ должно быть исключено из данного выражения (суммирование ведется по $k \neq n$). Указанные формулы применимы при условии, что матричные элементы оператора возмущения малы по сравнению с соответствующими разностями невозмущенных уровней энергии:

$$|V_{kn}| \ll |\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_k^{(0)}|. \quad (\text{VIII})$$

При наличии вырождения уровня $\varepsilon_n^{(0)}$ с какой-либо кратностью g данному уровню принадлежат g невозмущенных ортонормированных состояний $|k\rangle^{(0)}$ (где $k = n_1, \dots, n_g$). Всякая линейная комбинация этих состояний, с произвольными коэффициентами $C_k^{(0)}$, также является собственным вектором невозмущенного гамильтониана, принадлежащим тому же самому вырожденному уровню энергии. Возмущение \hat{V} порождает поправки к уровню $\varepsilon_n^{(0)}$ и тем самым частично или полностью снимает

вырождение. В первом приближении теории возмущений возникшему указанному семейству уровней энергии отвечают так называемые *правильные* состояния – линейные комбинации g состояний $|k\rangle^{(0)}$ с коэффициентами $C_k^{(0)}$, удовлетворяющими системе g однородных линейных уравнений:

$$\sum_{k'} (V_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'}) C_{k'}^{(0)} = 0, \quad (\text{IX})$$

где $k, k' = n_1, \dots, n_g$; $\varepsilon^{(1)}$ – параметр, значениями которого определяются сдвиги уровней энергии. Система уравнений (IX) имеет нетривиальные решения при условии

$$\det(V_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'}) = 0, \quad (\text{X})$$

называемом *секулярным* (или *вековым*) уравнением. Это есть уравнение степени g для $\varepsilon^{(1)}$. Его корни представляют собой искомые поправки первого приближения к вырожденному уровню энергии.

В нестационарном случае оператор возмущения $\hat{V}(t)$ зависит от времени. Решение волнового уравнения Шредингера с гамильтонианом (I) представляется в форме разложения по невозмущенным стационарным состояниям с зависящими от времени коэффициентами $C_k(t)$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k C_k(t) e^{-i\varepsilon_k^{(0)}t/\hbar} |k\rangle^{(0)}. \quad (\text{XI})$$

Неизвестные функции $C_k(t)$ удовлетворяют системе дифференциальных уравнений:

$$i\hbar \frac{dC_k(t)}{dt} = \sum_{k'} \tilde{V}_{kk'}(t) C_{k'}(t), \quad (\text{XII})$$

где $\tilde{V}_{kk'}(t)$ – матричные элементы оператора возмущения в так называемом *представлении взаимодействия*. Такие матричные элементы вычисляются по невозмущенным стационарным состояниям $|k\rangle^{(0)}$ и имеют следующий вид:

$$\tilde{V}_{kk'}(t) = \langle k | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} | k' \rangle = e^{i(\varepsilon_k^{(0)} - \varepsilon_{k'}^{(0)})t/\hbar} V_{kk'}(t). \quad (\text{XIII})$$

Подстановка в (XII) величин $C_k(t)$ в форме рядов теории возмущений,

$$C_k(t) = C_k^{(0)} + C_k^{(1)}(t) + C_k^{(2)}(t) + \dots, \quad (\text{XIV})$$

позволяет решать уравнения (XII) методом последовательных итераций. При этом должны быть заданы начальные условия.

Сформулируем результат, получающийся указанным выше путем. Если в начальный момент времени t' квантовое состояние системы совпадало с одним из невозмущенных стационарных состояний, например,

$$|\psi(t=t')\rangle = e^{-i\varepsilon_{n'}^{(0)}t'/\hbar} |n'\rangle^{(0)},$$

то

$$C_k^{(0)} = \delta_{kn'}, \quad C_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt_1 \tilde{V}_{kn'}(t_1), \quad (\text{XV})$$

$$C_k^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{k_1} \int_{t'}^t dt_2 \int_{t'}^{t_2} dt_1 \tilde{V}_{kk_1}(t_2) \tilde{V}_{k_1n'}(t_1). \quad (\text{XVI})$$

Общая формула для $C_k^{(m)}(t)$ при этом имеет вид

$$C_k^{(m)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \sum_{k_{m-1}} \dots \sum_{k_1} \int_{t'}^t dt_m \int_{t'}^{t_m} dt_{m-1} \dots \int_{t'}^{t_2} dt_1 \tilde{V}_{kk_{m-1}}(t_m) \dots \tilde{V}_{k_1n'}(t_1). \quad (\text{XVII})$$

Величина $|C_k(t)|^2$ представляет собой *вероятность перехода* системы за время $t-t'$ из начального состояния n' в конечное невозмущенное состояние k под влиянием возмущения $\hat{V}(t)$. В первом приближении для вероятности такого перехода при $k \neq n'$ имеем:

$$W_{kn'}^{(1)} = \left|C_k^{(1)}(t)\right|^2, \quad k \neq n' \quad (\text{XVIII})$$

Если для данного перехода матричный элемент оператора возмущения равен нулю, то вероятность перехода следует вычислять во втором порядке теории возмущений – как $\left|C_k^{(2)}(t)\right|^2$. Критерием применимости получаемых таким образом результатов является малость значений вероятности перехода по сравнению с единицей. В случаях, когда это условие не выполняется, для решения задачи о вероятности перехода $n' \rightarrow k$ следует вернуться к точным уравнениям (XII) и попытаться найти иной приближенный метод отыскания функций $C_k(t)$.

При рассмотрении переходов сложной квантовой системы в состояния,

принадлежащие непрерывному спектру энергии, применяют *золотое правило Ферми* для вероятности w переходов *за единицу времени*:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \rho_f(\varepsilon_i), \quad (\text{XIX})$$

где i и f – совокупности квантовых чисел системы в целом в начальном (initial) и конечном (final) состояниях; $\rho_f(\varepsilon_i)$ – плотность конечных состояний с энергией, равной энергии начального состояния; M_{fi} – матричный элемент перехода, определенным образом сопоставляемый оператору возмущения $\hat{V}(t)$.

Золотое правило применимо, в частности, к описанию рассеяния частицы в не зависящем от времени потенциальном поле $U(\mathbf{r})$. Если невозмущенные волновые функции частицы выбрать в виде плоских волн (состояния с определенным импульсом, отвечающие свободному движению), а в качестве матричных элементов перехода в первом приближении по $U(\mathbf{r})$ использовать величины $\langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle$, то результат можно записать в виде *формулы Борна* (первое *борновское приближение*) для сечения рассеяния $d\sigma$ частицы в телесный угол $d\Omega_{\mathbf{p}}$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |u(\mathbf{q})|^2. \quad (\text{XX})$$

Здесь m – масса частицы, $\mathbf{q} = (\mathbf{p} - \mathbf{p}')/\hbar$,

$$u(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}). \quad (\text{XXI})$$

Условием применимости приближения Борна является выполнение хотя бы одного из неравенств

$$U_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad U_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} ka, \quad (\text{XXII})$$

где U_0 – характерная величина потенциала, a – его радиус, $k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar = p/\hbar$.

Задачи

9.1. Выписать поправку первого порядка $\varepsilon_n^{(1)}$ к энергетическим уровням частицы в бесконечной прямоугольной одномерной потенциальной яме шириной a для произвольного возмущения $V(x)$.

9.2. Для частицы массы m с электрическим зарядом q , находящейся в основном состоянии в бесконечной прямоугольной потенциальной яме шириной a , найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетического уровня, вызванный однородным электрическим полем E .

9.3. Найти уровни энергии ангармонического линейного осциллятора с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4,$$

рассматривая члены $\alpha x^3 + \beta x^4$ как возмущение.

9.4. Стационарным состояниям электрона в сферически симметричной потенциальной яме $U(r)$ соответствуют уровни энергии $\varepsilon_{n,l}^{(0)}$. В общем случае поле $U(r)$ не является кулоновским, так что уровни энергии не вырождены по азимутальному квантовому числу l . Рассмотреть изменение этих энергетических уровней, возникающее под действием внешнего достаточно слабого однородного электрического поля \mathbf{E} (эффект Штарка).

9.5. Рассмотреть изменение первого из уровней энергии возбужденных состояний атома водорода, возникающее в линейном приближении по внешнему электрическому полю (линейный эффект Штарка на примере $2s, 2p$ -состояний атома водорода).

9.6. Для электрона в сферически симметричной потенциальной яме $U(r)$ обсудить расчет изменения энергетических уровней под действием внешнего однородного магнитного поля \mathbf{B} (эффект Зеемана).

Указания. Воспользоваться гамильтонианом Паули с учетом энергии спин-орбитального взаимодействия вида $\alpha(r)\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$. Определить линейный и квадратичный по магнитному полю операторы возмущения.

9.7. Рассмотреть эффект Зеемана применительно к $1s$ -уровню атома водорода с учетом сверхтонкой структуры этого уровня.

9.8. На примере состояний электрона $p_{1/2}$ и $p_{3/2}$ рассмотреть с помощью теории возмущений эффект Зеемана при произвольном отношении магнитной энергии к энергии спин-орбитального расщепления.

9.9. На линейный осциллятор с зарядом q начиная с момента времени $t_0 = 0$ и до момента времени t_1 действовало однородное электрическое поле

$E(t)$, изменявшееся во времени по произвольному закону. При $t < t_0$ осциллятор находился в n -м стационарном состоянии. Найти в первом порядке теории возмущений вероятности переходов в различные состояния для $t > t_1$.

9.10. Квантовая система, имеющая два стационарных состояния $|1\rangle, |2\rangle$ с невырожденными уровнями энергии $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ (двухуровневая система), подвергается периодическому возмущению вида

$$\hat{V}(t) = \hat{M} e^{-i\omega t} + \hat{M}^+ e^{i\omega t}$$

с частотой ω , близкой к $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$:

$$\omega = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar - \Delta,$$

где Δ – малая величина по сравнению с $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$. В начальный момент времени система находилась в одном из стационарных состояний: $|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle$. Найти состояние системы $|\psi(t)\rangle$ для произвольного момента времени.

Указания. Воспользоваться уравнениями (XII) введения к данной главе, опустив в них быстро осциллирующие слагаемые. В более общей постановке подобную задачу см. в [1,8].

9.11. Атом водорода, находящийся в основном состоянии, подвергается действию линейно поляризованной монохроматической электромагнитной волны высокой частоты: $\hbar\omega \gg Ry$. Если при этом длина волны велика по сравнению с размером атома (что имеет место при $\hbar\omega \ll 4\pi Ry/\alpha$, где $\alpha = e^2/\hbar c$), то электрическое поле волны можно считать однородным. Найти в первом порядке теории возмущений вероятность ионизации атома электрическим полем такой волны.

Указания. Условие $\hbar\omega \gg Ry$ позволяет принять упрощающее предположение, что конечное состояние электрона, вылетевшего из атома, приближенно описывается плоской волной. Считать, что однородное электрическое поле с частотой ω и векторной амплитудой \mathbf{E} задано посредством потенциалов

$$\varphi = 0, \quad \mathbf{A}(t) = -(c\mathbf{E}/\omega) \sin \omega t.$$

9.12. В условиях предыдущей задачи, но для случая с циркулярно поляризованной электромагнитной волной, распространяющейся в направлении оси z , найти угловую зависимость вероятности ионизации атома электрическим полем волны.

9.13. Рассмотреть в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния электрона на двух одинаковых силовых центрах, расположенных на расстоянии \mathbf{d} друг от друга.

9.14. Пользуясь формулой Борна, найти дифференциальное сечение рассеяния частицы с зарядом $Z_1 e$ в кулоновском поле неподвижного центра с зарядом $Z_2 e$.

9.15. Обсудить расчет в борновском приближении дифференциального сечения упругого рассеяния быстрых электронов атомом [1,8,10]. Результат выразить через *атомный формфактор* $F(\mathbf{q})$,

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

где функция $n(\mathbf{r})$ определяется плотностью $e n(\mathbf{r})$ электронного заряда в атоме.

Решения

9.1. Волновые функции невозмущенных стационарных состояний частицы в данной задаче имеют вид:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{2/a} \sin(\pi n x / a); & 0 \leq x \leq a, \\ 0; & x < 0, x > a, \end{cases} \quad (1)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$. Подставив (1) в выражение для поправки первого порядка к энергии частицы

$$\varepsilon_n^{(1)} = \langle n | \hat{V} | n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) V(x) \psi_n(x), \quad (2)$$

получаем:

$$\varepsilon_n^{(1)} = \frac{2}{a} \int_0^a dx V(x) \sin^2 \frac{\pi n x}{a}. \quad (3)$$

Отметим, что при достаточно больших n квадрат синуса быстро осциллирует, и его можно заменить средним значением, равным $1/2$; тогда:

$$\varepsilon_n^{(1)} \approx \frac{1}{a} \int_0^a dx V(x) = \bar{V}, \quad n \gg 1. \quad (4)$$

Видно, что при $n \gg 1$ поправка $\varepsilon_n^{(1)}$ не зависит от номера уровня и равна усредненной вдоль потенциальной ямы величине возмущающего потенциала.

9.2. Возмущением является энергия взаимодействия частицы с внешним электрическим полем E :

$$V(x) = -qE x . \quad (1)$$

Поправка первого порядка к n -му энергетическому уровню равна

$$\varepsilon_n^{(1)} = \langle n | \hat{V} | n \rangle = -\frac{2qE}{a} \int_0^a dx x \sin^2 \frac{\pi n x}{a} = -\frac{1}{2} qE a . \quad (2)$$

Эта величина не зависит от номера уровня и, следовательно, характеризует сдвиг энергетического спектра как целого.

Поправка второго порядка к энергии $\varepsilon_1^{(0)}$ основного состояния определяется формулой

$$\varepsilon_1^{(2)} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|\langle n | \hat{V} | 1 \rangle|^2}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_n^{(0)}} = q^2 E^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|\langle n | \hat{x} | 1 \rangle|^2}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_n^{(0)}} , \quad (3)$$

где

$$\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (1 - n^2) , \quad (4)$$

$$\langle n | \hat{x} | 1 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a dx x \sin \frac{\pi n x}{a} \sin \frac{\pi x}{a} . \quad (5)$$

Не приводя здесь деталей вычисления матричных элементов (5), выпишем результат для $n \geq 2$:

$$\langle n | \hat{x} | 1 \rangle = \begin{cases} -\frac{8an}{\pi^2 (n-1)^2 (n+1)^2} ; & n = 2, 4, 6, \dots , \\ 0 ; & n = 3, 5, 7, \dots . \end{cases} \quad (6)$$

Используя (4) и (6) в (3), получаем:

$$\varepsilon_1^{(2)} = -\frac{128}{\pi^6} \frac{ma^4 q^2 E^2}{\hbar^2} \sum_{n=2,4,6,\dots} \frac{n^2}{(n-1)^4 (n+1)^4 (n^2-1)} \equiv -\frac{1}{2} \beta E^2 . \quad (7)$$

Ряд (7) быстро сходится, поэтому величина $\varepsilon_1^{(2)}$ приблизительно равна первому члену этого ряда; в таком приближении значение коэффициента β есть

$$\beta \approx 4.4 \cdot 10^{-3} m a^4 q^2 / \hbar^2 . \quad (8)$$

9.3. Прежде всего поясним происхождение слагаемых

$$\hat{V} = \alpha x^3 + \beta x^4 \quad (1)$$

в гамильтониане

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4 . \quad (2)$$

В общем случае задача заключается в определении энергетических уровней частицы вблизи дна потенциальной ямы $U(x)$ достаточно произвольного вида. Если функция $U(x)$ в окрестности своего минимума и ее производные не имеют особенностей, то можно представить $U(x)$ в форме ряда Тейлора по степеням отклонения координаты x от точки минимума x_0 . Удобно выбрать эту точку x_0 в качестве начала координат, и считать значение потенциала U в точке минимума равным нулю. Учтем также, что первая производная функции $U(x)$ в точке минимума обращается в нуль. Тогда указанный степенной ряд запишется в виде

$$U(x) = \frac{1}{2} U''(0) x^2 + \frac{1}{3!} U'''(0) x^3 + \frac{1}{4!} U^{IV}(0) x^4 + \dots . \quad (3)$$

Здесь первое слагаемое, очевидно, соответствует потенциалу гармонического осциллятора с квадратом собственной частоты $\omega_0^2 = U''(0)/m$, а следующие слагаемые в той области значений x , где они достаточно малы по сравнению с первым членом, можно рассматривать как *ангармонические* поправки к потенциалу осциллятора. Обозначив $U'''(0)/3! = \alpha$, $U^{IV}(0)/4! = \beta$, и отбросив члены ряда (3) высокой степени, приходим к задаче с гамильтонианом (2).

В нулевом приближении по отношению к возмущению (1) энергетические уровни осциллятора известны:

$$\varepsilon_n^{(0)} = \hbar \omega_0 (n + 1/2) , \quad n = 0, 1, 2, \dots . \quad (4)$$

Поправка к энергии первого порядка по α обращается в нуль,

$$\varepsilon_n^{(1)} = \alpha \langle n | \hat{x}^3 | n \rangle = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} dx x^3 \psi_n^2(x) = 0 , \quad (5)$$

так как под знаком интеграла с симметричными пределами в (5) присутствует нечетная функция переменной интегрирования. Здесь и ниже $|n\rangle$ –

невозмущенные стационарные состояния гармонического осциллятора. Для вычисления поправки к энергии второго порядка по α найдем сначала матричные элементы оператора \hat{x}^3 . Проще всего это делается с помощью представления оператора координаты в форме

$$\hat{x} = \sqrt{\hbar/2m\omega_0} (\hat{a} + \hat{a}^+) , \quad (6)$$

где \hat{a} и \hat{a}^+ – «бозонные» операторы уничтожения и рождения (см. задачу 6.7), характеризующиеся соотношениями:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle , \quad \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle . \quad (7)$$

Несложное вычисление с использованием равенств (7) дает:

$$(2m\omega_0/\hbar)^{3/2} \hat{x}^3|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle + 3n^{3/2}|n-1\rangle + 3(n+1)^{3/2}|n+1\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}|n+3\rangle . \quad (8)$$

Скалярно умножая (8) на $|n'\rangle$ и учитывая условие $\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$, имеем:

$$\begin{aligned} \langle n-3|\hat{x}^3|n\rangle &= (\hbar/2m\omega_0)^{3/2} \sqrt{n(n-1)(n-2)} , \\ \langle n-1|\hat{x}^3|n\rangle &= (\hbar/2m\omega_0)^{3/2} 3n^{3/2} , \\ \langle n+1|\hat{x}^3|n\rangle &= (\hbar/2m\omega_0)^{3/2} 3(n+1)^{3/2} , \\ \langle n+3|\hat{x}^3|n\rangle &= (\hbar/2m\omega_0)^{3/2} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} . \end{aligned} \quad (9)$$

Лишь перечисленные здесь матричные элементы оператора \hat{x}^3 могут быть отличны от нуля; в этом перечне отсутствуют диагональные элементы, что согласуется с (5). Используя (4) и (9) в формуле для поправки к энергии второго порядка по α , получаем (сумма содержит четыре слагаемых):

$$\sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'|\alpha \hat{x}^3|n\rangle|^2}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_{n'}^{(0)}} = -\frac{15}{4} \frac{\alpha^2}{\hbar\omega_0} \left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^3 \left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) . \quad (10)$$

Для вычисления поправки к энергии первого порядка по β надо найти диагональные матричные элементы оператора $\beta \hat{x}^4$. Применяя к обеим сторонам равенства (8) оператор (6) и следя теперь только за теми членами, которые могут дать вклад в диагональный матричный элемент оператора \hat{x}^4 , в итоге найдем:

$$\beta \langle n | \hat{x}^4 | n \rangle = \frac{3\beta}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega_0} \right)^2 (n^2 + n + 1/2). \quad (11)$$

Суммируя (4), (10) и (11), получаем следующее приближенное выражение для уровней энергии ангармонического осциллятора:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{15}{4} \frac{\alpha^2}{\hbar\omega_0} \left(\frac{\hbar}{m\omega_0} \right)^3 \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) + \frac{3\beta}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega_0} \right)^2 \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right)$$

9.4. Энергию частицы с зарядом q в однородном электрическом поле \mathbf{E} будем рассматривать как оператор возмущения \hat{V} :

$$\hat{V} = -q\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{r}}. \quad (1)$$

Направим ось z вдоль \mathbf{E} ; тогда

$$\hat{V} = -qE \hat{z}. \quad (2)$$

Стационарные состояния частицы в невозмущенном потенциальном поле $U(r)$ характеризуются квантовыми числами n_r, l, m :

$$\Psi_{n_r, l, m}(\mathbf{r}) = R_{n_r, l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3)$$

Сначала рассмотрим диагональные матричные элементы оператора возмущения (2):

$$\langle n_r, l, m | \hat{V} | n_r, l, m \rangle = -qE \langle n_r, l, m | \hat{z} | n_r, l, m \rangle. \quad (4)$$

Эти матричные элементы обращаются в нуль:

$$\langle n_r, l, m | \hat{z} | n_r, l, m \rangle = \int d^3\mathbf{r} z |\Psi_{n_r, l, m}(\mathbf{r})|^2 = 0. \quad (5)$$

В том, что интеграл (5) равен нулю, проще всего убедиться с помощью следующих соображений. Как известно, по отношению к инверсии координатных переменных ($\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$) состояния с определенной величиной орбитального момента l обладают определенной четностью, $(-1)^l$, и, следовательно, функция $|\Psi_{n_r, l, m}|^2$ четна. Так как z меняет свой знак при замене в (5) переменных интегрирования $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, то имеющаяся под интегралом функция $z|\Psi_{n_r, l, m}|^2$ нечетна, и интеграл должен обратиться в нуль.

Невозмущенные уровни энергии частицы $\varepsilon_{n_r, l}$ обладают $(2l + 1)$ -кратным вырождением по магнитному квантовому числу m . Поэтому теперь необходимо найти недиагональные по m матричные элементы возмущения и выяснить, не следует ли использовать методы теории возмущений с вырождением. Учитывая равенства, связывающие друг с другом декартовы и сферические координаты,

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta, \quad (6)$$

заметим, что

$$\begin{aligned} x \pm iy &= r \sin \theta e^{\pm i\varphi} = \mp r \sqrt{8\pi/3} Y_{1, \pm 1}, \\ z &= r \sqrt{4\pi/3} Y_{1, 0}. \end{aligned} \quad (7)$$

В силу (7) угловая часть функции $z \psi_{n_r, l, m}$ равна $Y_{1, 0} Y_{l, m}$ и ее можно формально рассматривать как величину, аналогичную волновой функции произведения состояний вида

$$|1, 0\rangle \otimes |l, m\rangle \equiv |1, 0; l, m\rangle.$$

Подобная аналогия основывается на том, что указанное произведение векторов состояния и функция $z \psi_{n_r, l, m}$ обладают одинаковым поведением по отношению к операторам вращений. Тогда должно иметь место следующее соотношение пропорциональности

$$\langle n'_r, l', m' | \hat{z} | n_r, l, m \rangle \sim \langle l', m' | 1, 0; l, m \rangle. \quad (8)$$

Согласно правилу сложения моментов вектор состояния $|1, 0; l, m\rangle$ является одним из базисных векторов в разложении состояний $|l', m'\rangle$ с суммарным моментом l' , то есть – состояний с проекцией момента

$$m' = m_1 + m_2 \quad (9)$$

и величиной момента

$$l' = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|. \quad (10)$$

Следовательно, состояние $|1, 0; l, m\rangle$, в свою очередь, допускает разложение по состояниям $|l', m'\rangle$ со значениями l' и m' , указанными в (10) и (9). Положив $m_1 = 0$, $m_2 = m$, $l_1 = 1$, $l_2 = l$, мы заключаем, таким образом, что правая сторона соотношения (8) может быть отлична от нуля только при $m' = m$ и $l' = l + 1, l, l - 1$. Этот вывод сделан лишь с учетом свойств состояний по

отношению к вращениям, но еще следует принять во внимание четность состояний, характеризующую их поведение при инверсии координат (операция инверсии является дискретной и не сводится к какой-либо последовательности вращений). Четность состояний $|l', m'\rangle$ и $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = |l_1, m_1; l_2, m_2\rangle$ есть $(-1)^{l'}$ и $(-1)^{l_1+l_2}$, соответственно. Состояния с различной четностью взаимно ортогональны, поэтому правая сторона (8) обращается в нуль при $l' = l$. Другими словами, матричный элемент (8) может быть не равен нулю только для состояний с противоположной четностью.

Таким образом, мы приходим к следующим *правилам отбора* для матричных элементов оператора координаты z :

$$z: \quad m' = m, \quad l' = l+1, l-1. \quad (11)$$

Заодно отметим, что угловая часть произведения $(x \pm iy)\psi_{n_r, l, m}$ равна $Y_{1, \pm 1} Y_{l, m}$. Поэтому аналогичным путем легко придти и к правилам отбора для матричных элементов $\langle l', m' | (\hat{x} \pm i\hat{y}) | l, m \rangle$:

$$x + iy: \quad m' = m + 1, \quad l' = l + 1, \quad l - 1, \quad (12)$$

$$x - iy: \quad m' = m - 1, \quad l' = l + 1, \quad l - 1. \quad (13)$$

Правила отбора – это необходимые условия, при которых матричные элементы могут быть отличны от нуля. Можно показать [1,10], что правила отбора (11)–(13) верны не только для операторов координат, но и для операторов любой векторной величины, проекции которой при поворотах и инверсии преобразуются аналогично компонентам радиус-вектора \mathbf{r} (такие векторы называют полярными).

Согласно (11) недиагональные по m матричные элементы возмущения (2) равны нулю, и поэтому вырождение уровней энергии $\varepsilon_{n_r, l}$ по m в данной задаче не ведет к необходимости использовать теорию возмущений с вырождением. Кроме того, в условии задачи предполагается отсутствие вырождения по l . С учетом (5) мы заключаем, что в первом приближении поправки к энергии равны нулю.

Таким образом, изменение энергетических уровней $\varepsilon_{n_r, l}$ следует рассматривать во втором порядке по электрическому полю. Поправки к энергии второго порядка определяются формулой

$$\varepsilon_k^{(2)} = \sum_{k' \neq k} \frac{|\langle k' | \hat{V} | k \rangle|^2}{\varepsilon_k^{(0)} - \varepsilon_{k'}^{(0)}} \equiv -\frac{1}{2} \beta_k E^2, \quad (14)$$

где

$$\beta_k = -2q^2 \sum_{k' \neq k} \frac{|\langle k' | \hat{z} | k \rangle|^2}{\varepsilon_k^{(0)} - \varepsilon_{k'}^{(0)}} , \quad (15)$$

k означает совокупность квантовых чисел n_r, l, m ; роль невозмущенных значений энергии $\varepsilon_k^{(0)}$ играют уровни $\varepsilon_{n_r, l}$. Коэффициент β_k представляет собой *поляризуемость* k -го стационарного состояния рассматриваемой здесь атомной системы (частицы в поле $U(r)$, создаваемом закрепленным в начале координат центром притяжения). Действительно, определим дипольный электрический момент системы формулой $\mathbf{d} = q\mathbf{r}$, так что

$$\hat{d}_z = q\hat{z} \quad (16)$$

и

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - E\hat{d}_z . \quad (17)$$

Тогда

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial E} = -\hat{d}_z ,$$

и в соответствии с формулой (11) задачи 6.8 имеем:

$$-\langle k | \hat{d}_z | k \rangle = \partial \varepsilon_k / \partial E . \quad (18)$$

Подставив в правую часть (18) найденное во втором порядке теории возмущений выражение для собственных значений ε_k гамильтониана \hat{H}

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^{(0)} - \frac{1}{2} \beta_k E^2 , \quad (19)$$

найдем, что в k -ом стационарном состоянии индуцируемый направленным вдоль z полем \mathbf{E} усредненный дипольный момент системы есть

$$\langle d_z \rangle = \beta_k E . \quad (20)$$

Это равенство и характеризует величину β_k как поляризуемость системы.

Для основного состояния ($n_r = 0, l = 0, m = 0$) знаменатель в (15) отрицателен и, следовательно, поляризуемость β_0 основного состояния положительна, уровень энергии основного состояния во внешнем электрическом поле смещается вниз. Конечно, поправка к энергии основного состояния во втором порядке теории возмущений отрицательна при любом виде возмущения.

В выражении (15) для поляризуемости состояния с квантовыми числами n_r , l , m отличны от нуля, согласно (11), матричные элементы $\langle n_r', l \pm 1, m | \hat{z} | n_r, l, m \rangle$ (если $l = 0$, то допустимым будет лишь $l' = 1$). Они зависят от квантовых чисел рассматриваемого состояния, поэтому от этих чисел, в частности от m , зависят поляризуемость и энергетический сдвиг (14). Следовательно, внешнее электрическое поле \mathbf{E} снимает вырождение энергетических уровней по m . Однако такое снятие вырождения не может быть полным. Действительно, гамильтониан с потенциалом $U(r) - qEz$ инвариантен к отражению в любой плоскости, проходящей через ось z . Поэтому стационарные состояния, получающиеся друг из друга указанным отражением, физически эквивалентны и должны иметь одну и ту же энергию. Но поскольку момент импульса является аксиальным вектором, а не полярным, такие состояния обладают противоположными значениями проекции момента $l_z \equiv m$. Значит, уровни энергии возмущенных состояний, возникающие при расщеплении вырожденного по m уровня $\varepsilon_{n_r, l}$ под действием приложенного внешне электрического поля, для противоположных значений m совпадают.

Изменение энергии стационарных состояний атомной системы под влиянием внешнего электрического поля получило название *эффекта Штарка*.

В задаче 3.4 упоминалось о притяжении на большом расстоянии R между атомом водорода H и ионом H^+ (протоном), которое возникает за счет индуцируемого у атома H электрического дипольного момента. Теперь мы можем обсудить этот вопрос с использованием полученных выше формул (15) и (19). Прежде всего заметим, что в случае водородоподобных атомов (то есть для частицы в кулоновском поле $U(r)$) имеется так называемое *случайное вырождение* энергетических уровней по квантовому числу l , и, следовательно, для этих уровней можно ожидать возникновения линейного по электрическому полю эффекта Штарка (см. задачу 9.5). Кроме того, при учете спин-орбитального взаимодействия в расчете эффекта Штарка следует принимать во внимание тонкую структуру уровней. Однако эти замечания не актуальны для основного состояния атома водорода ($1s$ -состояние), поскольку $1s$ -уровень не имеет орбитального вырождения и не испытывает спин-орбитального расщепления.

Электрическое поле

$$E = |e| / R^2, \quad (21)$$

создаваемое около пребывающего в основном состоянии атома H находящимся на большом расстоянии ($R \gg a_B$) ионом H^+ можно считать практически однородным. Подставив (21) в (19), для энергии $u(R)$ взаимодействия H и H^+ , представляющей собой поправку к энергии атома

водорода в поле (21), получим:

$$u(R) = -\frac{\beta e^2}{2R^4}, \quad (22)$$

где β – поляризуемость атома водорода в основном состоянии. В силу неравенства $\beta > 0$ энергия (22) отрицательна, и, следовательно, соответствует притяжению между H и H^+ . Формула (15) с $q = e$ для поляризуемости атома водорода в основном состоянии приводит к значению

$$\beta = \frac{9}{2} a_B^3. \quad (23)$$

Вывод результата (23) и подробный анализ эффекта Штарка в атоме водорода заинтересованный читатель найдет в [1].

9.5. Кратность вырождения уровня $\varepsilon_{n=2}$ атома водорода без учета спина электрона равна четырем: этому уровню принадлежат три $2p$ -состояния ($l = 1$) и одно $2s$ -состояние ($l = 0$). Пронумеруем указанные состояния, например, следующим образом:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |n = 2, l = 0, m = 0\rangle, & |2\rangle &= |n = 2, l = 1, m = 0\rangle, \\ |3\rangle &= |n = 2, l = 1, m = 1\rangle, & |4\rangle &= |n = 2, l = 1, m = -1\rangle. \end{aligned} \quad (1)$$

Для определения поправок $\varepsilon^{(1)}$ первого приближения к энергии состояний (1) при наличии возмущения

$$\hat{V} = -qE \hat{z} \quad (2)$$

в соответствии с формулами теории возмущений с вырождением следует найти матрицу $V_{kk'}$ оператора (2) в базисе (1) и решить секулярное уравнение

$$\det(V_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'}) = 0. \quad (3)$$

Воспользуемся правилами отбора, приведенными в задаче 9.4. Согласно формуле (11) указанной задачи можно утверждать, что не равными нулю могут быть лишь два из шестнадцати интересующих нас матричных элементов:

$$\langle 2 | \hat{z} | 1 \rangle^* = \langle 1 | \hat{z} | 2 \rangle \neq 0. \quad (4)$$

Вычислим величины (4). Напомним читателю вид нескольких первых радиальных функций $R_{nl}(r)$ в задаче о стационарных состояниях в дискретной

части энергетического спектра атома водорода:

$$\begin{aligned} 1s & R_{10} = (2/\sqrt{a^3}) e^{-\rho}, \\ 2s & R_{20} = (1/\sqrt{2a^3})(1-\rho/2) e^{-\rho/2}, \\ 2p & R_{21} = (1/2\sqrt{6a^3}) e^{-\rho/2} \rho, \end{aligned}$$

где $a = a_B$ – радиус Бора, $\rho = r/a$. Таким образом, волновая функция состояния $|1\rangle$ равна

$$R_{20} Y_{00} = (1/\sqrt{8\pi a^3})(1-\rho/2) e^{-\rho/2}. \quad (5)$$

Волновая функция для $\hat{z}|2\rangle$ с учетом равенства $z = r \cos \theta = r \sqrt{4\pi/3} Y_{10}$ имеет вид

$$r \sqrt{4\pi/3} Y_{10} R_{21} Y_{10} = \sqrt{\pi/18a} e^{-\rho/2} \rho^2 (Y_{10})^2. \quad (6)$$

Перемножив (5) и (6) и интегрируя получившееся выражение по радиальной и угловым координатам, получим:

$$\langle 1|\hat{z}|2\rangle = \frac{a}{12} \int_0^\infty d\rho \rho^4 (1-\rho/2) e^{-\rho} \int d\Omega (Y_{10})^2. \quad (7)$$

В силу вещественности величины Y_{10} и условия

$$\int d\Omega Y_{l'm'}^* Y_{lm} = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (8)$$

интеграл по углам в (7) равен единице. Радиальный интеграл в (7) вычисляется с помощью формулы

$$\int_0^\infty d\rho \rho^k e^{-\rho} = \Gamma(k+1) = k!; \quad (9)$$

он равен -36 . Таким образом,

$$\langle 2|\hat{z}|1\rangle = \langle 1|\hat{z}|2\rangle = -3a \quad (10)$$

и

$$V_{21} = V_{12} = 3aeE, \quad \text{остальные } V_{kk'} = 0. \quad (11)$$

Тот факт, что все матричные элементы оператора возмущения, связанные с состояниями $|3\rangle$ и $|4\rangle$, равны нулю, означает, что эти два состояния уже

являются правильными состояниями, и соответствующее им значение энергии ($\varepsilon_{n=2}$) не испытывает изменения в первом приближении по электрическому полю. Для определения поправок $\varepsilon^{(1)}$ к энергии состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ решаем уравнение

$$\det \begin{pmatrix} -\varepsilon^{(1)} & 3aeE \\ 3aeE & -\varepsilon^{(1)} \end{pmatrix} = 0. \quad (12)$$

Оно имеет два корня:

$$\varepsilon^{(1)} = \pm 3aeE. \quad (13)$$

Таким образом, внешнее электрическое поле расщепляет четырехкратно вырожденный уровень атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ на три уровня. Один из этих уровней двукратно вырожден и в первом порядке теории возмущений равен своему невозмущенному значению; два других уровня отделены от него энергетическими интервалами (13), увеличивающимися пропорционально напряженности приложенного извне электрического поля (линейный эффект Штарка).

Этот результат применим для случая не слишком слабого поля, когда интервалы (13) намного превышают энергию спин-орбитального расщепления, так что последней можно пренебречь. Но поле не должно быть и слишком сильным, поскольку теория возмущений применима только до тех пор, пока определяемые ею поправки к уровням энергии малы по сравнению с исходными интервалами между уровнями. Кроме того, в очень сильном поле картина эффекта Штарка усложняется явлением ионизации атома за счет туннельного эффекта. Действительно, потенциал вида $-e^2/r - eEz$ в одном из направлений вдоль оси z имеет форму барьера. С некоторой вероятностью, исчезающе малой при $E \rightarrow 0$, электрон может проникнуть сквозь барьер, так что при наличии внешнего электрического поля ($E \neq 0$) каждый дискретный уровень атома, строго говоря, оказывается квазистационарным и характеризуется некоторой шириной Γ , малой в меру малости туннельной проницаемости барьера. Малой ширине уровня отвечает большое время жизни ($\tau \sim \hbar/\Gamma$) квазистационарного состояния, поэтому с практической точки зрения состояния атома в не слишком сильном поле можно с хорошей точностью считать стационарными. Однако с ростом напряженности внешнего поля E высота и ширина потенциального барьера уменьшаются, и вероятность выхода электрона из атома посредством туннельного эффекта существенно увеличивается; проникнув сквозь барьер, электрон будет ускоряться внешним полем E и удалится от образовавшегося иона.

9.6. Гамильтониан рассматриваемой атомной системы в пренебрежении взаимодействием магнитных моментов электрона и «иона», создающего потенциал $U(r)$, имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(r) + \alpha(r) \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}} - \frac{\mu_e}{s} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B}. \quad (1)$$

Здесь масса m , спин $s = 1/2$, магнитный момент $\mu_e = -1.00116 \mu_B$ и электрический заряд $e < 0$ относятся к электрону.

Направим ось z вдоль \mathbf{B} . При этом векторный потенциал \mathbf{A} однородного магнитного поля ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$) целесообразно выбрать в форме

$$A_x = -yB/2, \quad A_y = xB/2, \quad A_z = 0. \quad (2)$$

Такой выбор векторного потенциала позволяет выделить в гамильтониане (1) слагаемое, пропорциональное оператору проекции орбитального момента импульса электрона

$$\hat{l}_z = -i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x). \quad (3)$$

Действительно, раскрыв в (1) скобки и учитывая равенства (2),(3), получим:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) + \alpha(r) \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}} - \frac{e\hbar}{2mc} B \hat{l}_z - 2\mu_e B \hat{s}_z + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2. \quad (4)$$

Последнее слагаемое в (4) в случае достаточно слабого магнитного поля, очевидно, следует трактовать, как квадратичное по магнитному полю возмущение,

$$\frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 = \frac{e^2 B^2}{8mc^2} (x^2 + y^2), \quad (5)$$

а два предшествующих члена в (4) будут играть роль возмущения, линейного по магнитному полю. Учитывая, что заряд электрона отрицателен ($e = -|e|$) и что $|\mu_e| \approx |e|\hbar/2mc \equiv \mu_B$, линейный по магнитному полю оператор возмущения можно представить в форме

$$\hat{V} = \mu_B B \left(\hat{l}_z + 2 \frac{|\mu_e|}{\mu_B} \hat{s}_z \right) \approx \mu_B B (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z). \quad (6)$$

Сравним друг с другом величины отдельных слагаемых гамильтониана. Предположим, что спектр уровней невозмущенного гамильтониана, представляющего собой сумму первых трех членов в (4), характеризуется

энергетическим масштабом $\sim Ry \sim 10^{-11}$ эрг. Пусть $B \sim 10^5$ Гс – порядок максимальных значений магнитного поля, доступных в обычных лабораторных условиях при измерении энергетических спектров атомов. Тогда $\mu_B B \sim 10^{-15}$ эрг $\sim 10^{-4} Ry$, причем величина квадратичного по полю члена (5) при $\langle x^2 + y^2 \rangle \sim a_B^2$ составит всего 10^{-20} эрг. Таким образом, оператор (6) действительно можно рассматривать как малое возмущение, а квадратичным по полю слагаемым (5) в рассматриваемых условиях следует вообще пренебречь.

Заметим в то же время, что найденный порядок величины энергии (6) оказывается сопоставимым с масштабом интервалов тонкой структуры ($Ry(e^2/\hbar c)^2 \sim 10^{-4} Ry$), обусловленной релятивистскими поправками к уровням энергии атома. В гамильтониане (4) такие поправки представлены оператором спин-орбитального взаимодействия $\alpha(r)\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$. В связи с этим необходимо различать два предельных случая: а) при слабом магнитном поле, когда энергия $\mu_B B$ мала по сравнению с интервалами тонкой структуры уровней, невозмущенными состояниями будут состояния $|j, m\rangle$ с определенным полным моментом j , равным квантово-механической сумме орбитального момента l и спина электрона $s = 1/2$; б) в сильных магнитных полях, когда энергия $\mu_B B$ велика по сравнению с интервалами тонкой структуры, можно пренебречь спин-орбитальным взаимодействием и в качестве невозмущенных состояний рассматривать состояния $|l, m_l\rangle \otimes |s = 1/2, m_s\rangle$, где m_l и m_s – проекции на ось z орбитального момента электрона и его спина, соответственно. Обсудим для обоих случаев характер поправок к энергии, возникающих в первом порядке по возмущению (6).

а) *Слабое поле*: $\mu_B B \ll |\varepsilon_{nj} - \varepsilon_{nj'}|$, где $|\varepsilon_{nj} - \varepsilon_{nj'}|$ – разность соседних значений энергии в семействе уровней с одним и тем же радиальным квантовым числом n , расщепленных за счет спин-орбитального взаимодействия (предполагается, что такая разность существенно меньше интервала между уровнями с различными значениями n). Магнитное поле нарушает сферическую симметрию исходной системы (остается лишь аксиальная симметрия относительно оси z), поэтому следует ожидать, что каждый $(2j+1)$ -кратно вырожденный по m уровень ε_{nj} испытывает расщепление, малое в меру малости $\mu_B B$, и вырождение по m снимается. Интересуясь именно этим расщеплением уровня ε_{nj} , мы должны найти матричные элементы оператора (6) по $(2j+1)$ состояниям $|j, m\rangle$ с заданным полным моментом j и всевозможными значениями проекции полного момента $m = m_l + m_s$, причем заданными являются также орбитальный момент l и спин

$s = 1/2$. Каждое такое состояние имеет вид суммы

$$|j, m\rangle = \sum_{m_s} C_{l m_l s m_s}^{j m} |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle \quad (7)$$

по тем значениям m_s (и m_l), для которых $m_l + m_s$ равно значению m , указанному в левой стороне равенства (7).

Запишем присутствующую в (6) комбинацию операторов в форме

$$\hat{l}_z + 2\hat{s}_z = \hat{J}_z + \hat{s}_z, \quad (8)$$

так что

$$\hat{V} = \mu_B B (\hat{J}_z + \hat{s}_z). \quad (9)$$

Матрица оператора проекции полного момента $\hat{J}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z$ в базисе (7) диагональна:

$$\langle j, m' | \hat{J}_z | j, m \rangle = m \delta_{m'm}. \quad (10)$$

Покажем, что матрица оператора \hat{s}_z , определяемая по состояниям (7), также диагональна (то есть оператор \hat{s}_z может иметь недиагональные элементы только для состояний с разными значениями j , но не для состояний с одинаковыми j и разными m). Скалярно умножив левую и правую стороны равенства

$$\hat{s}_z |j, m\rangle = \sum_{m_s} C_{l m_l s m_s}^{j m} |l, m_l\rangle \otimes \hat{s}_z |s, m_s\rangle = \sum_{m_s} C_{l m_l s m_s}^{j m} m_s |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle$$

на вектор состояния

$$|j, m'\rangle = \sum_{m'_s} C_{l m'_l s m'_s}^{j m'} |l, m'_l\rangle \otimes |s, m'_s\rangle, \quad (11)$$

где $m'_l + m'_s = m'$, получим

$$\begin{aligned} \langle j, m' | \hat{s}_z | j, m \rangle &= \sum_{m'_s} \sum_{m_s} C_{l m'_l s m'_s}^{j m'} C_{l m_l s m_s}^{j m} m_s \langle l, m'_l | l, m_l \rangle \langle s, m'_s | s, m_s \rangle = \\ &= \sum_{m'_s} \sum_{m_s} C_{l m'_l s m'_s}^{j m'} C_{l m_l s m_s}^{j m} m_s \delta_{m'_l m_l} \delta_{m'_s m_s}. \end{aligned} \quad (12)$$

Если $m' \neq m$, то произведения дельта-символов в правой стороне (12) не могут отличаться от нуля, и матричный элемент (12) исчезает. При $m' = m$ не равные нулю слагаемые с $m'_l = m_l$ и $m'_s = m_s$ в правой стороне (12) существуют, и мы

получим:

$$\langle j, m | \hat{s}_z | j, m \rangle = \sum_{m_s} |C_{lm_l sm_s}^{jm}|^2 m_s . \quad (13)$$

Итак, поскольку в базисе (7) с заданным j оператор (9) не имеет недиагональных матричных элементов, то для поправок первого приближения $\varepsilon^{(1)}$ к уровню ε_{nj} секулярное уравнение не возникает. Следовательно, эти поправки даются диагональными матричными элементами оператора возмущения (9):

$$\varepsilon_{jm}^{(1)} = \langle j, m | (\hat{J}_z + \hat{s}_z) | j, m \rangle = \mu_B B (m + \langle s_z \rangle) . \quad (14)$$

Величина $\langle s_z \rangle$, в принципе, может быть вычислена по формуле (13), однако, как можно показать [1], для нее существует более простое выражение:

$$\langle s_z \rangle = m \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} . \quad (15)$$

С учетом (15) результат для энергии расщепления (14) запишется в виде:

$$\varepsilon_{jlm}^{(1)} = g \mu_B B m , \quad m = j, j-1, \dots, -j , \quad (16)$$

где

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \quad (17)$$

есть так называемый *множитель Ланде*.

В s -состояниях ($l = 0$) полный момент равен спину, и, согласно формуле (17), $g = 2$. При $l \geq 1$ для случая $s = 1/2$ полный момент принимает только два значения, $j = l \pm 1/2$, и формула (17) дает:

$$g = 1 \pm (2l+1)^{-1} . \quad (18)$$

По аналогии с результатом (18) задачи 9.4, взятую с противоположным знаком производную от энергии атома по магнитному полю следует интерпретировать как среднее значение магнитного момента атома. Дифференцируя по B приведенное выше выражение (16), найдем, что атомная система, находящаяся в состоянии с определенным значением m проекции полного момента импульса на некоторое направление z , обладает магнитным моментом

$$\langle \mu_z \rangle = -g \mu_B m \quad (19)$$

в указанном направлении.

б) В случае *сильного поля* ($\mu_B B \gg |\varepsilon_{n_j} - \varepsilon_{n_j'}|$) можно пренебречь в нулевом приближении тонкой структурой уровней $\varepsilon_{n_r, l}$, считая стационарными состояния

$$|n_r, l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle. \quad (20)$$

В то же время мы предполагаем, что $\mu_B B \ll |\varepsilon_{n_r, l'} - \varepsilon_{n_r, l}|$, и, следовательно, теория возмущений с оператором (6) все еще применима. В базисе (20) оператор возмущения (6) имеет только диагональные матричные элементы:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle = & \mu_B B \langle n_r, l, m_l | \hat{l}_z | n_r, l, m_l \rangle \langle s, m_s | s, m_s \rangle + \\ & + 2\mu_B B \langle n_r, l, m_l | n_r, l, m_l \rangle \langle s, m_s | \hat{s}_z | s, m_s \rangle = \mu_B B (m_l + 2m_s). \end{aligned} \quad (21)$$

Они и являются поправками первого приближения по магнитному полю, определяющими расщепление уровня $\varepsilon_{n_r, l}$:

$$\varepsilon_{m_l m_s}^{(1)} = \mu_B B (m_l + 2m_s). \quad (22)$$

К каждому из найденных значений энергии $\varepsilon_{n_r, l} + \varepsilon_{m_l m_s}^{(1)}$ теперь можно добавить соответствующую поправку первого приближения по спин-орбитальному взаимодействию. Такие поправки представляют собой средние значения оператора $\alpha(r) \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ в состояниях (20). Поскольку волновая функция орбитального состояния $|n_r, l, m_l\rangle$ имеет вид произведения радиальной и угловой частей, $R_{n_r, l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, то при усреднении оператора $\alpha(r) \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ по состояниям (20) или по любым нормированным линейным комбинациям таких состояний с неизменными квантовыми числами n_r, l происходит замена функции $\alpha(r)$ некоторой постоянной A , зависящей от квантовых чисел n_r, l :

$$A = \int_0^\infty dr r^2 |R_{n_r, l}(r)|^2 \alpha(r). \quad (23)$$

Имея это в виду, можно записывать оператор спин-орбитального взаимодействия в форме

$$A \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = A (\hat{l}_x \hat{s}_x + \hat{l}_y \hat{s}_y + \hat{l}_z \hat{s}_z) \quad (24)$$

и при вычислении его средних значений (или матричных элементов по любым

состояниям с заданными n_r, l) учитывать лишь угловую и спиновую части рассматриваемых состояний. Таким образом, интересующее нас среднее значение энергии спин-орбитального взаимодействия есть

$$\begin{aligned} \langle \alpha(r) \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \rangle &= A \langle l, m_l | \hat{l}_x | l, m_l \rangle \langle s, m_s | \hat{s}_x | s, m_s \rangle + \\ &+ A \langle l, m_l | \hat{l}_y | l, m_l \rangle \langle s, m_s | \hat{s}_y | s, m_s \rangle + \\ &+ A \langle l, m_l | \hat{l}_z | l, m_l \rangle \langle s, m_s | \hat{s}_z | s, m_s \rangle . \end{aligned} \quad (25)$$

Как известно, средние значения x - и y - проекций момента в состояниях с определенным значением z -проекции момента импульса равны нулю. Поэтому выражение (25) сводится только к вкладу последнего члена и равно $A m_l m_s$. Добавив эту поправку к (22), находим окончательно, что изменение уровня энергии $\varepsilon_{n_r, l}$ в сильном магнитном поле определяется соотношением

$$\Delta \varepsilon_{n_r, l} = \mu_B B (m_l + 2m_s) + A m_l m_s . \quad (26)$$

В качестве простейшего примера рассмотрим эту формулу в применении к двукратно вырожденному по спину s -уровню электрона, то есть – к дублету $s_{1/2}$ состояний с $j = s = 1/2$, $l = 0$. В этом случае $m_l = 0$, проекция полного момента равна проекции спина ($m = m_s$), так что формула (26) и соотношения (16), (17) дают один и тот же результат:

$$s_{1/2}: \quad \Delta \varepsilon = 2 \mu_B B m , \quad m = \pm 1/2 . \quad (27)$$

Таким образом, электронный s -уровень в магнитном поле B испытывает расщепление на два уровня энергии стационарных состояний, отделенных друг от друга энергетическим интервалом $\varepsilon_{\uparrow} - \varepsilon_{\downarrow} = 2 \mu_B B$. Такая же картина была получена в задаче 8.5. Следует отметить, что при учете сверхтонкой структуры $s_{1/2}$ -дублета мы приходим к более сложному результату (см. задачу 9.7); в задаче 9.8 обсуждается еще один достаточно сложный пример – влияние магнитного поля на уровни энергии $p_{1/2}$ - и $p_{3/2}$ -состояний электрона.

Изменение энергетических уровней атома под действием внешнего магнитного поля называют *эффектом Зеемана*. В частности, такой термин применяют, говоря о расщеплении уровней, описываемом формулами (16), (17); при этом возникающее в сильных магнитных полях отклонение энергетического спектра от предсказываемого формулами (16), (17) называют *эффектом Пашена–Бака*.

Проведенное выше рассмотрение касалось модели атома с одним электроном, но аналогичные результаты удастся получить и для сложных

атомов, содержащих несколько электронов [1]. Несмотря на то, что электроны образуют сложную систему взаимодействующих друг с другом частиц, стационарные состояния системы электронов в атоме в силу сферической симметрии кулоновского поля ядра можно в определенном приближении характеризовать достаточно простым образом – суммарным орбитальным моментом L , суммарным спином электронов S и полным моментом импульса J . Не останавливаясь на обосновании этих утверждений, опишем лишь способ обозначения атомных уровней энергии (называемых также спектральными термами атома). Состояния с различными значениями полного орбитального момента $L = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ обозначаются в той же последовательности символами S, P, D, F, G, \dots . Слева вверху около такого символа указывают число $2S + 1$ (называемое мультиплетностью терма и равное числу спиновых состояний атома при данном суммарном спине электронов), а справа внизу – значение полного момента J ; например, символом ${}^2P_{1/2}$ обозначается уровень с $L = 1$, $S = 1/2$, $J = 1/2$. Можно показать, что для сложных атомов в слабом магнитном поле будут справедливы формулы (16), (17), а в сильном поле – (26), если в этих формулах заменить «малые» буквы j, l, s и $m = m_l + m_s$ соответствующими «большими» буквами: J, L, S и $M = M_l + M_s$.

Существенно новый для нас аспект здесь заключается в том, что сложный атом может иметь состояние с равным нулю суммарным спином.

При $S = 0, L \neq 0$ множитель Ланде g равен единице. В этом случае расщепление уровня энергии атома магнитным полем называют *нормальным* эффектом Зеемана. При отличном от единицы множителе Ланде расщепление, описываемое формулами (16), (17), называют *аномальным* эффектом Зеемана; такое название связано с тем, что до открытия спина электрона наблюдаемый в опытах эффект Зеемана с $g \neq 1$ не удавалось объяснить.

Сложный атом может не иметь ни спина ($S = 0$), ни орбитального момента ($L = 0$), так что и полный момент обращается в нуль ($J = 0$). Тогда линейный по магнитному полю оператор $\mu_B B (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$, очевидно, не дает смещения уровней ни в каком порядке теории возмущений, поскольку все его матричные элементы исчезают. Для такого состояния атома смещение энергетического уровня в первом исчезающем приближении равно среднему значению квадратичного по полю возмущения, которое имеет вид суммы вкладов от всех электронов в атоме (индекс i нумерует электроны):

$$\Delta\varepsilon = \frac{e^2}{8mc^2} H^2 \sum_i \langle x_i^2 + y_i^2 \rangle. \quad (28)$$

Магнитное поле здесь обозначено посредством H . Поскольку усреднение операторов координат электронов в данном случае проводится в сферически

симметричном состоянии атома, то $\langle x_i^2 + y_i^2 \rangle = \frac{2}{3} \langle r_i^2 \rangle$. Вычислив магнитный момент атома по формуле $\langle \mu_z \rangle = -\partial \Delta \varepsilon / \partial H$, получим $\langle \mu_z \rangle = \chi H$, где коэффициент χ , представляющий собой магнитную восприимчивость атома в рассматриваемом состоянии, как видно из (28), определяется следующим соотношением, называемым *формулой Ланжевена*:

$$\chi = -\frac{e^2}{6mc^2} \sum_i \langle r_i^2 \rangle. \quad (29)$$

Согласно (29) величина χ отрицательна, то есть атомы с $L = S = 0$ диамагнитны [1].

9.7. При выборе оси z в направлении внешнего магнитного поля **V** оператор энергии взаимодействия спиновых магнитных моментов электрона и протона друг с другом и с внешним магнитным полем имеет вид

$$\hat{V} = C \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 - \mu_e \hat{\sigma}_{z1} B - \mu_p \hat{\sigma}_{z2} B, \quad (1)$$

где матрицы Паули с номерами 1 и 2 действуют на спиновые состояния электрона и протона, соответственно; $C > 0$ – постоянная, определяющая энергетический масштаб сверхтонкой структуры 1s-уровня атома водорода (см. задачу 8.8).

Построим матрицу оператора (1) по спиновым состояниям с определенными значениями z -проекции спина обеих рассматриваемых частиц:

$$|1\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2, \quad |2\rangle = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, \quad |3\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, \quad |4\rangle = |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2. \quad (2)$$

В базисе (2) второе и третье слагаемые оператора (1) обладают лишь диагональными матричными элементами, а матрица $\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2$ имеет уже известный нам блочно-диагональный вид (см. формулу (8) в задаче 8.6). Обозначив

$$a = -\mu_e + \mu_p, \quad b = -\mu_e - \mu_p, \quad (3)$$

получаем

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} -C + aB & 2C & 0 & 0 \\ 2C & -C - aB & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C + bB & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C - bB \end{pmatrix}. \quad (4)$$

В пренебрежении взаимодействием, описываемым оператором (1), состояния (2) обладают одной и той же энергией, то есть в таком приближении $1s$ -уровень энергии атома водорода четырехкратно вырожден по спиновым квантовым числам (по z -проекциям спина) электрона и протона. Полагая, что приложенное внешнее магнитное поле B является достаточно слабым, будем рассматривать оператор (1) в качестве возмущения. Тогда определяемые им поправки первого приближения к $1s$ -уровню энергии следует найти как корни $\varepsilon^{(1)}$ секулярного уравнения

$$\det(V_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'}) = 0,$$

где $V_{kk'}$ – элементы матрицы (4). Это уравнение имеет четыре корня:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^{(1)} &= -C + \sqrt{4C^2 + a^2 B^2}, & \varepsilon_2^{(1)} &= -C - \sqrt{4C^2 + a^2 B^2}, \\ \varepsilon_3^{(1)} &= C + bB, & \varepsilon_4^{(1)} &= C - bB. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, во внешнем магнитном поле, влияние которого учитывается одновременно с взаимодействием между магнитными моментами электрона и ядра атома, указанное выше вырождение $1s$ -уровня энергии полностью снимается. Возникающее при этом расщепление уровня схематически изображено на рис. 9.1. В количественных оценках следует учитывать, что $-\mu_e \approx \mu_B \gg \mu_p$ и $a = b + 2\mu_p \approx \mu_B$.

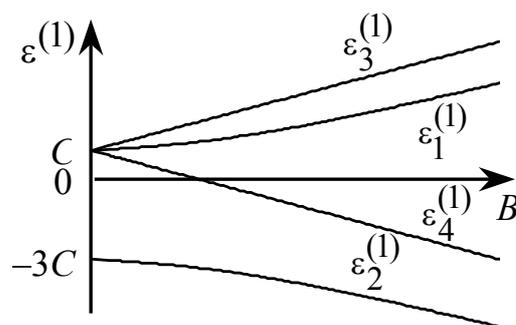


Рис. 9.1

Полученный результат можно пояснить следующим образом. В отсутствие внешнего магнитного поля взаимодействующие друг с другом спин электрона и спин ядра образуют единую спиновую подсистему атома, которая может находиться в синглетном состоянии (с равным нулю суммарным спином и энергией $-3C$) или в одном из вырожденных триплетных состояний (с равным единице суммарным спином и энергией C). В слабом внешнем поле, при $\mu_B B \ll C$, возникает линейное по полю расщепление энергетического уровня спинового триплета, а энергия синглетного спинового состояния почти не изменяется:

$$\text{триплет: } \begin{cases} \varepsilon_3^{(1)} = C + bB, \\ \varepsilon_1^{(1)} = C, \\ \varepsilon_4^{(1)} = C - bB, \end{cases}$$

$$\text{синглет: } \varepsilon_2^{(1)} = -3C, \quad \mu_B B \ll C. \quad (6)$$

С увеличением магнитного поля, при $\mu_B B \gg C$, связь электронного и ядерного магнитного моментов практически разрывается и роль стационарных состояний переходит к состояниям (2), характеризующимся отсутствием корреляции между электронным и ядерным спинами. Этим состояниям отвечают четыре уровня энергии, $-2(\mu_e \sigma_1 + \mu_p \sigma_2)B$, где σ_1 и σ_2 – проекции спинов электрона и протона на направление внешнего магнитного поля, независимо друг от друга принимающие значения $\pm 1/2$. К каждому из этих уровней добавляется поправка (ее достаточно взять в первом приближении), обусловленная взаимодействием магнитных моментов электрона и протона. Такая поправка определяется как диагональный матричный элемент оператора $C \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2$ в соответствующем состоянии (2) и равна просто $4C \sigma_1 \sigma_2$. Легко видеть, что именно указанные четыре значения энергии и дают формулы (5) при $\mu_B B \gg C$:

$$\varepsilon_1^{(1)} = -C + aB, \quad \varepsilon_2^{(1)} = -C - aB, \quad \varepsilon_3^{(1)} = C + bB, \quad \varepsilon_4^{(1)} = C - bB. \quad (7)$$

9.8. Как показано в задаче 9.6, при выборе оси z вдоль направления приложенного извне магнитного поля \mathbf{B} оператор возмущения, линейный по полю и включающий спин-орбитальное взаимодействие, имеет вид:

$$\hat{V} = A \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} + \mu_B B (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) = A \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} + \mu_B B (\hat{J}_z + \hat{s}_z). \quad (1)$$

Состояния $p_{1/2}$ и $p_{3/2}$ можно представить в форме линейных комбинаций базисных векторов состояния вида $|l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle$:

$$|j, m\rangle = \sum_{m_s} C_{l m_l m_s}^{j m} |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle, \quad (2)$$

где $s = 1/2$ – спин электрона, $l = 1$ – орбитальный момент электрона в p -состояниях, $m = m_l + m_s$ – проекция суммарного момента импульса электрона. Без учета возмущения (1) перечисленные базисные состояния и любые их линейные комбинации принадлежат одному и тому же шестикратно вырожденному (по m_l и m_s) p -уровню энергии. Для того чтобы найти поправки $\varepsilon^{(1)}$ первого приближения, обусловленные возмущением (1), следует решить секулярное уравнение

$$\det(V_{kk'} - \varepsilon^{(1)} \delta_{kk'}) = 0, \quad (3)$$

где $V_{kk'}$ – матрица 6×6 , соответствующая оператору возмущения (1). Эту матрицу можно взять как в « lm_lsm_s -представлении» (с базисом $|l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle$), так и в « $jmls$ -представлении» (с базисом (2)). В первом случае в недиагональную часть матрицы \hat{V} дает вклад лишь член $A\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$, а во втором – $\mu_B B \hat{s}_z$, поскольку матрицы $\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ и \hat{J}_z , как нам известно, диагональны в базисе (2). Выберем, например, второй вариант.

Явный вид состояний (2) легко получить с помощью закона сложения моментов, привлекая формулы, которыми определяется действие операторов

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{l}_{\pm} + \hat{s}_{\pm}. \quad (4)$$

Так, согласно правилу сложения моментов, в состоянии с суммарной проекцией момента $m = 3/2$ вклад может дать лишь $|l = 1, m_l = 1\rangle \otimes |s = 1/2, m_s = 1/2\rangle$ и, следовательно,

$$|j = 3/2, m = 3/2\rangle = |l = 1, m_l = 1\rangle \otimes |s = 1/2, m_s = 1/2\rangle. \quad (5)$$

Применив к обеим сторонам равенства (5) оператор $\hat{J}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_-$, найдем состояние $|j = 3/2, m = 1/2\rangle$, а затем, повторяя подобную процедуру, получим и остальные члены квартета $p_{3/2}$. Состояние $|j = 1/2, m = 1/2\rangle$, как и $|j = 3/2, m = 1/2\rangle$, должно иметь вид линейной комбинации состояний с $m_l = 0, m_s = 1/2$ и $m_l = 1, m_s = -1/2$, так что оно вполне определяется условиями нормировки и ортогональности к предварительно найденному состоянию $|j = 3/2, m = 1/2\rangle$:

$$|1/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0\rangle \otimes |m_s = 1/2\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 1\rangle \otimes |m_s = -1/2\rangle. \quad (6)$$

Второе состояние дублета $p_{1/2}$ получаем из (6) с помощью понижающего оператора $\hat{J}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_-$.

Выпишем определяемые указанным образом векторы состояний (2), обозначая для краткости состояния $|l = 1, m_l\rangle \otimes |s = 1/2, m_s\rangle$ как $|m_l\rangle \otimes |m_s\rangle$, где $m_l = 1, 0, -1$, $m_s = \uparrow, \downarrow$, и присваивая состояниям (2) номера k , которые ниже будут использованы для нумерации матричных элементов $V_{kk'}$:

$$P_{3/2}: \begin{cases} |3/2, 3/2\rangle & = |1\rangle \otimes |\uparrow\rangle & = |5\rangle \\ |3/2, 1/2\rangle & = \sqrt{\frac{2}{3}} |0\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1\rangle \otimes |\downarrow\rangle & = |1\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle & = \frac{1}{\sqrt{3}} |-1\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |0\rangle \otimes |\downarrow\rangle & = |3\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle & = |-1\rangle \otimes |\downarrow\rangle & = |6\rangle \end{cases} \quad (7)$$

$$P_{1/2}: \begin{cases} |1/2, 1/2\rangle & = \frac{1}{\sqrt{3}} |0\rangle \otimes |\uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |1\rangle \otimes |\downarrow\rangle & = |2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle & = \sqrt{\frac{2}{3}} |-1\rangle \otimes |\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |0\rangle \otimes |\downarrow\rangle & = |4\rangle \end{cases} \quad (8)$$

В этом базисе оператор $A\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ диагонален, причем его диагональные элементы определяются формулой (см. также (5) в задаче 8.7)

$$\frac{A}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))_{l=1, s=1/2} = \begin{cases} A/2, & j = 3/2; \\ -A, & j = 1/2. \end{cases}$$

Оператор $\mu_B B \hat{J}_z$ также диагонален, его матричные элементы имеют вид

$$\mu_B B \langle \hat{J}_z \rangle = \mu_B B m, \quad m = j, j-1, \dots, -j.$$

Диагональные матричные элементы оператора \hat{s}_z , представляющие собой средние значения для перечисленных выше состояний $|k\rangle$, находим с использованием равенств (7), (8):

$$\begin{aligned} \langle 1|\hat{s}_z|1\rangle &= 1/6, & \langle 2|\hat{s}_z|2\rangle &= -1/6, & \langle 3|\hat{s}_z|3\rangle &= -1/6, \\ \langle 4|\hat{s}_z|4\rangle &= 1/6, & \langle 5|\hat{s}_z|5\rangle &= 1/2, & \langle 6|\hat{s}_z|6\rangle &= -1/2. \end{aligned} \quad (9)$$

Такие же значения $\langle s_z \rangle$ дает и формула (15) задачи 9.6 (эта формула в нашем изложении остается недоказанной). Наконец, замечаем, что будут не равны нулю лишь те недиагональные элементы оператора \hat{s}_z , которые связывают состояния $|k\rangle$ с различными j при одинаковых m :

$$\langle 1|\hat{s}_z|2\rangle = \langle 2|\hat{s}_z|1\rangle = \langle 3|\hat{s}_z|4\rangle = \langle 4|\hat{s}_z|3\rangle = \sqrt{2}/3.$$

Собрав все вместе и обозначив $\mu_B B = \varepsilon$, получаем

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} A/2 + 2\varepsilon/3 & \varepsilon\sqrt{2}/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \varepsilon\sqrt{2}/3 & -A + \varepsilon/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A/2 - 2\varepsilon/3 & \varepsilon\sqrt{2}/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon\sqrt{2}/3 & -A - \varepsilon/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A/2 + 2\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A/2 - 2\varepsilon \end{pmatrix}$$

Найденная матрица \hat{V} имеет блочно-диагональное строение. Видно, что ее диагональные элементы V_{55} и V_{66} уже являются корнями (двумя из шести) секулярного уравнения (3), а остальные четыре корня $\varepsilon^{(1)}$ определяются из двух не связанных друг с другом уравнений второй степени:

$$\begin{aligned} (A/2 + 2\varepsilon/3 - \varepsilon^{(1)})(-A + \varepsilon/3 - \varepsilon^{(1)}) - 2\varepsilon^2/9 &= 0, \\ (A/2 - 2\varepsilon/3 - \varepsilon^{(1)})(-A - \varepsilon/3 - \varepsilon^{(1)}) - 2\varepsilon^2/9 &= 0. \end{aligned}$$

Таким образом, искомые поправки к шестикратно вырожденному уровню энергии электронных p -состояний имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(-\frac{A}{2} + \mu_B B + \sqrt{9A^2/4 + \mu_B B A + (\mu_B B)^2} \right), \\ \varepsilon_2^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(-\frac{A}{2} + \mu_B B - \sqrt{9A^2/4 + \mu_B B A + (\mu_B B)^2} \right), \\ \varepsilon_3^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(-\frac{A}{2} - \mu_B B + \sqrt{9A^2/4 + \mu_B B A + (\mu_B B)^2} \right), \\ \varepsilon_4^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(-\frac{A}{2} - \mu_B B - \sqrt{9A^2/4 + \mu_B B A + (\mu_B B)^2} \right), \\ \varepsilon_5^{(1)} &= A/2 + 2\mu_B B, \\ \varepsilon_6^{(1)} &= A/2 - 2\mu_B B. \end{aligned} \tag{10}$$

Отвечающая соотношениям (10) картина расщепления p -уровня схематично показана на рис. 9.2.

При рассмотрении эффекта Зеемана в слабом поле ($\mu_B B \ll A$) формулы (10) приводят к тем же результатам, что и соотношения (16), (17) задачи 9.6 со

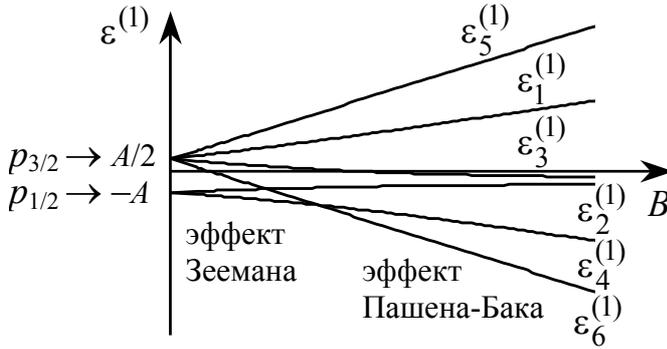


Рис. 9.2

значениями множителя Ланде $g = 2/3$ для $p_{1/2}$ -состояний и $g = 4/3$ для $p_{3/2}$ -состояний. В сильном поле ($\mu_B B \gg A$) формулы (10) описывают эффект Пашена–Бака, в согласии с результатом (26) задачи 9.6.

9.9. В задаче о линейном осцилляторе, движущемся в присутствии внешней силы $F(t) = qE(t)$, оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V}(t) = -F(t) \hat{x} . \quad (1)$$

Для определения матричных элементов оператора (1) по невозмущенным стационарным состояниям осциллятора $|n\rangle$ удобно воспользоваться известным представлением оператора координаты \hat{x} линейного осциллятора (с массой m и собственной частотой ω_0) через операторы уничтожения и рождения \hat{a} , \hat{a}^+ :

$$\hat{V}(t) = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} F(t) (\hat{a} + \hat{a}^+) . \quad (2)$$

Поскольку

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle , \quad \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle , \quad (3)$$

то среди матричных элементов оператора (2) могут быть отличными от нуля лишь

$$V_{n-1,n} = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} F(t) \sqrt{n} , \quad V_{n+1,n} = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} F(t) \sqrt{n+1} . \quad (4)$$

Поэтому в первом порядке теории возмущений возможны лишь следующие переходы: $n \rightarrow n-1$ (при $n \geq 1$), $n \rightarrow n+1$.

С учетом известного выражения для энергетического спектра линейного гармонического осциллятора ($\varepsilon_n = \hbar\omega_0(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$) матричные элементы оператора возмущения (1) в представлении взаимодействия принимают вид:

$$\tilde{V}_{n'n} = e^{i(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)t/\hbar} V_{n'n} = e^{i(n'-n)\omega_0 t} V_{n'n} . \quad (5)$$

Согласно формуле (XV) введения к данной главе для амплитуд вероятности переходов $n \rightarrow n-1$ и $n \rightarrow n+1$ в первом приближении имеем:

$$C_{n-1, n}^{(1)} = i \sqrt{\frac{n}{2m\hbar\omega_0}} \int_{-\infty}^{\infty} dt F(t) e^{-i\omega_0 t}, \quad (6)$$

$$C_{n+1, n}^{(1)} = i \sqrt{\frac{n+1}{2m\hbar\omega_0}} \int_{-\infty}^{\infty} dt F(t) e^{i\omega_0 t}. \quad (7)$$

Пределы интегрирования здесь выбраны в виде $\pm\infty$, поскольку функция $F(t)$ может быть не равна нулю только в промежутке времени от t_0 до t_1 , и этот промежуток в условиях рассматриваемой задачи полностью содержится внутри интервала интегрирования, простирающегося от $t' < t_0$ до $t > t_1$.

Заметим, что величина

$$f(\omega_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dt F(t) e^{i\omega_0 t} \quad (8)$$

представляет собой компоненту Фурье функции $F(t)$ на частоте $\omega = \omega_0$, и введем обозначение

$$\alpha = \frac{if(\omega_0)}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}. \quad (9)$$

Тогда амплитуды вероятности (6) и (7) примут вид

$$C_{n-1, n}^{(1)} = \sqrt{n} (-\alpha^*), \quad C_{n+1, n}^{(1)} = \sqrt{n+1} \alpha. \quad (10)$$

Возводя в квадрат модули амплитуд (10), находим искомые вероятности переходов:

$$W_{n-1, n}^{(1)} = n |\alpha|^2, \quad (11)$$

$$W_{n+1, n}^{(1)} = n |\alpha|^2 + |\alpha|^2. \quad (12)$$

Эти формулы применимы в случае «слабого» источника внешней силы, когда неравенство $|\alpha|^2 \ll 1$ выполняется с необходимым запасом.

Если интерпретировать число n как число частиц-квантов с энергией $\hbar\omega_0$, то формуле (11) можно дать простое объяснение: вероятность того, что источником возмущения будет поглощена энергия $\hbar\omega_0$, равна вероятности поглощения $|\alpha|^2$ единственного кванта, помноженной на число квантов n ,

имеющихся в начальном состоянии. При этом в формуле (12) второе слагаемое, не исчезающее при $n = 0$, представляет собой вероятность «спонтанного» рождения кванта энергии $\hbar\omega_0$ источником возмущения, а первое слагаемое, пропорциональное числу уже имеющихся квантов, следует истолковать как вероятность «стимулированного» рождения кванта: имеющиеся в начальном состоянии частицы-кванты стимулируют рождение еще одной такой же частицы.

Согласно (4) все матричные элементы оператора возмущения $V_{n'n}$ с $n' \neq n \pm 1$ равны нулю. Переходы, для которых матричные элементы оператора возмущения равны нулю, в теории возмущений принято называть *запрещенными*. Этот термин однако не означает, что запрещенный переход вообще не возможен. Вероятность такого перехода исчезает лишь в первом порядке, а в высших порядках теории возмущений вероятность запрещенного перехода уже может отличаться от нуля. В этом легко убедиться на рассматриваемом здесь примере осциллятора, возмущаемого заданной внешней силой (упражнение для читателя).

Не обращаясь к теории возмущений можно показать [8], что если начальным состоянием осциллятора является основное состояние, то после окончания действия внешней силы осциллятор окажется в когерентном состоянии, характеризующемся комплексным параметром (9). Свойства такого состояния мы рассматривали в задаче 6.9.

9.10. Решение $|\psi(t)\rangle$ волнового уравнения Шредингера с гамильтонианом $\hat{H} + \hat{V}(t)$ в случае двухуровневой системы ищем в виде

$$|\psi(t)\rangle = C_1(t)e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} |1\rangle + C_2(t)e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar} |2\rangle, \quad (1)$$

где функции $C_1(t)$ и $C_2(t)$ определяются уравнениями:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{dC_1}{dt} = \tilde{V}_{11} C_1 + \tilde{V}_{12} C_2, \\ i\hbar \frac{dC_2}{dt} = \tilde{V}_{21} C_1 + \tilde{V}_{22} C_2. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь $\tilde{V}_{nn'} = e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_{n'})t/\hbar} V_{nn'}$ – матричные элементы оператора возмущения в представлении взаимодействия. Матричные элементы указанного в условии задачи оператора

$$V(t) = \hat{M} e^{-i\omega t} + \hat{M}^+ e^{i\omega t}, \quad (3)$$

присутствующие в уравнениях (2), имеют вид:

$$\tilde{V}_{11} = M_{11} e^{-i\omega t} + M_{11}^* e^{i\omega t}, \quad \tilde{V}_{22} = M_{22} e^{-i\omega t} + M_{22}^* e^{i\omega t}, \quad (4)$$

$$\tilde{V}_{12} = \tilde{V}_{21}^* = M_{12} e^{i(2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\hbar + \Delta)t} + M_{21}^* e^{-i\Delta t}, \quad (5)$$

где посредством Δ обозначена «расстройка» частоты возмущения по отношению к «частоте перехода» $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$:

$$\Delta = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar - \omega. \quad (6)$$

Согласно условию задачи, величина Δ мала в сравнении с частотами $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$, ω .

Все величины (4), а также то слагаемое в (5), которое содержит в показателе экспоненты удвоенную частоту перехода, быстро осциллируют по сравнению с членами $e^{\pm i\Delta t}$. Предполагая, что при интегрировании уравнений (2) по интервалу времени $t \gg 1/\omega$ быстро осциллирующие слагаемые дадут лишь малый вклад в искомые функции $C_1(t)$ и $C_2(t)$, отбросим все такие слагаемые. Перейдя указанным образом от системы точных уравнений (2) к приближенным уравнениям, имеем:

$$\begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = -\frac{iM_{21}^*}{\hbar} e^{-i\Delta t} C_2, \\ \frac{dC_2}{dt} = -\frac{iM_{21}}{\hbar} e^{i\Delta t} C_1. \end{cases} \quad (7)$$

Решим систему приближенных уравнений (7) точно. Исключим из этих уравнений одну из двух неизвестных функций, например, $C_1(t)$. Дифференцируя второе уравнение по t и избавляясь от C_1 и dC_1/dt с помощью обоих уравнений (7), получаем однородное линейное дифференциальное уравнение второго порядка для $C_2(t)$:

$$\frac{d^2 C_2}{dt^2} = i\Delta \frac{dC_2}{dt} - \frac{|M_{21}|^2}{\hbar^2} C_2. \quad (8)$$

Частные решения уравнения (8) ищем в виде

$$C_2(t) = A e^{i\nu t}, \quad A \neq 0. \quad (9)$$

Подставив (9) в (8), имеем уравнение для параметра ν :

$$\nu^2 - \nu\Delta - |M_{21}|^2/\hbar^2 = 0. \quad (10)$$

Найдя его корни ν_1 и ν_2 ,

$$v_1 = \Delta/2 - \sqrt{\Delta^2/4 + |M_{21}|^2/\hbar^2}, \quad v_2 = \Delta/2 + \sqrt{\Delta^2/4 + |M_{21}|^2/\hbar^2}, \quad (11)$$

получаем два линейно независимых решения вида (9). Общее решение уравнения (8) представляет собой линейную комбинацию найденных частных решений с произвольными постоянными коэффициентами A и B :

$$C_2(t) = A e^{iv_1 t} + B e^{iv_2 t}. \quad (12)$$

При этом второе уравнение системы (7) дает нам функцию $C_1(t)$:

$$C_1(t) = -\frac{\hbar}{M_{21}} e^{-it\Delta} \left(v_1 A e^{iv_1 t} + v_2 B e^{iv_2 t} \right). \quad (13)$$

Постоянные A и B определяются начальными данными, которые согласно условию задачи имеют вид:

$$C_1(0) = 1, \quad C_2(0) = 0. \quad (14)$$

С помощью (12)–(14) находим, что $A = -B = M_{21}/2\hbar\Omega$, где посредством Ω обозначена величина $(v_2 - v_1)/2$:

$$\Omega = \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{|M_{21}|^2}{\hbar^2}}. \quad (15)$$

В результате, найденные функции $C_1(t)$ и $C_2(t)$ принимают следующий окончательный вид:

$$C_1(t) = e^{-it\Delta/2} \left(\cos \Omega t + \frac{i\Delta}{2\Omega} \sin \Omega t \right), \quad (16)$$

$$C_2(t) = -\frac{iM_{21}}{\hbar\Omega} e^{it\Delta/2} \sin \Omega t. \quad (17)$$

Таким образом, начальное стационарное состояние $|1\rangle$ двухуровневой системы под действием периодического возмущения с частотой ω , близкой к $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$, переходит в суперпозицию стационарных состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ с коэффициентами (16) и (17). Квадраты модулей этих коэффициентов представляют собой вероятности $W_1(t)$ и $W_2(t)$ обнаружения системы к моменту времени t в состояниях $|1\rangle$ и $|2\rangle$, соответственно. Согласно (15)–(17) выражения для этих вероятностей имеют вид:

$$W_1(t) = \left| \cos \Omega t + \frac{i\Delta}{2\Omega} \sin \Omega t \right|^2 = 1 - W_2(t) , \quad (18)$$

$$W_2(t) = \left| \frac{M_{21}}{\hbar\Omega} \sin \Omega t \right|^2 = \frac{|M_{21}|^2}{2\hbar^2\Omega^2} (1 - \cos 2\Omega t) . \quad (19)$$

Из (19) видно, что вероятность перехода $1 \rightarrow 2$ – периодическая функция времени с частотой 2Ω . При точном резонансе (то есть при $\Delta = 0$) вероятность обнаружения системы в состоянии $|2\rangle$ принимает вид

$$W_2(t) = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2|M_{21}|t}{\hbar} \right) . \quad (20)$$

Тот факт, что вероятность (20) изменяется от нуля до единицы, означает, что система периодически с достоверностью переходит из состояния $|1\rangle$ в состояние $|2\rangle$ и возвращается из $|2\rangle$ в $|1\rangle$.

По ходу вывода формул (18), (19) не делалось предположения о малости матричного элемента M_{21} . Теперь сделаем такое предположение и убедимся в том, что если за достаточно большое время t вероятность перехода $1 \rightarrow 2$, описываемая выражением (19), за счет малости матричного элемента M_{21} остается малой в сравнении с единицей, то формула (19) приводит к известному результату первого приближения нестационарной теории возмущений.

При $|M_{21}| \ll \hbar\Delta$ имеем $\Omega \approx \Delta/2 = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega)/2\hbar$, так что в первом неисчезающем приближении по M_{21} выражение (19) принимает вид

$$W_2(t) = |M_{21}|^2 \frac{4 \sin^2((\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega)t/2\hbar)}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega)^2} . \quad (21)$$

Его можно записать также в другом виде:

$$W_2(t) = t \frac{2\pi}{\hbar} |M_{21}|^2 F(t, \varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega) , \quad (22)$$

где функция

$$F(t, \varepsilon) \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2(\varepsilon t/2\hbar)}{\varepsilon^2 t/2\hbar} \quad (23)$$

от аргумента ε ведет себя подобно «размытой» дельта-функции и обращается в дельта-функцию при $t \rightarrow \infty$:

$$F(t, \varepsilon) \rightarrow \delta(\varepsilon) , \quad t \rightarrow \infty . \quad (24)$$

Для каждого фиксированного значения интервала времени $t = \tau$ ширина $\delta\varepsilon$ размытой дельта-функции (23) по порядку величины составляет

$$\delta\varepsilon \sim \hbar / \tau . \quad (25)$$

Во многих практических задачах характерный интервал времени τ между актом приготовления начального состояния и регистрацией конечного состояния таков, что $\delta\varepsilon \ll (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \sim \hbar\omega$ и, следовательно, можно в (22) произвести замену (24). В результате мы получаем известную формулу для вероятности перехода $w_{21} = W_2(t)/t$ за единицу времени:

$$w_{21} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{21}|^2 \delta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega) . \quad (26)$$

Поясним роль дельта-функции в (26) следующим примером. Рассмотрим электрон в потенциальной яме с двумя уровнями энергии (двухуровневая модель атома). Пусть переход $1 \rightarrow 2$ обусловлен взаимодействием электрического дипольного момента атома $\hat{\mathbf{d}} = e\hat{\mathbf{r}}$ (где $\hat{\mathbf{r}}$ – оператор координат электрона) с электрическим полем

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E} \cos \omega t = \frac{1}{2} \mathbf{E} e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} \mathbf{E} e^{i\omega t} \quad (27)$$

линейно поляризованной монохроматической электромагнитной волны (\mathbf{E} – амплитудный вектор волны). При этом оператор возмущения имеет вид:

$$\hat{V}(t) = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}(t) = -\frac{1}{2} \hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E} e^{-i\omega t} - \frac{1}{2} \hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E} e^{i\omega t} . \quad (28)$$

Зависимость поля от координат здесь не учтена, так как предполагается, что длина волны много больше размера атома.

При $\omega \approx \varepsilon_2 - \varepsilon_1 > 0$ после преобразования к представлению взаимодействия медленно осциллирующим становится первый член в правой стороне (28); одним этим членом и определяется матричный элемент перехода:

$$M_{21} = -\frac{1}{2} \langle 2 | \hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E} | 1 \rangle = -\frac{1}{2} \mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{E} = -(\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{e}) E / 2 , \quad (29)$$

где $\mathbf{e} = \mathbf{E} / E$ – единичный вектор направления поляризации электромагнитной волны, E – амплитудное значение напряженности электрического поля, \mathbf{d}_{21} – матричный элемент оператора дипольного момента атома для перехода $1 \rightarrow 2$.

Выразим множитель E^2 в

$$|M_{21}|^2 = |\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{e}|^2 E^2 / 4$$

через усредненную за период интенсивность I электромагнитной волны (усредненная по времени плотность потока электромагнитной энергии),

$$I = \frac{c}{4\pi} \overline{|\mathbf{E}(t) \times \mathbf{B}(t)|} = \frac{cE^2}{4\pi} \overline{\cos^2 \omega t} = \frac{c}{8\pi} E^2, \quad (30)$$

и подставим результат в (26). Обозначая $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar = \omega_2 - \omega_1$ и учитывая, что $\delta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \hbar\omega) = (1/\hbar) \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega)$, получаем:

$$w_{21} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2 c} |\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{e}|^2 I \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega). \quad (31)$$

Теперь откажемся от условия строгой монохроматичности волны (27). Будем считать, что энергия волны распределена по некоторому интервалу частот, включающему значение $\omega_2 - \omega_1$, и что интенсивность в (31) может быть записана как $I = J(\omega)d\omega$, где $J(\omega)$ – спектральная плотность интенсивности. В этом случае полная вероятность перехода за единицу времени, представляющая собой сумму вкладов от спектральных составляющих поля с близкими значениями частот, должна определяться путем интегрирования выражения (31) по ω :

$$w = \frac{4\pi^2}{\hbar^2 c} |\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{e}|^2 \int d\omega J(\omega) \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega) = \frac{4\pi^2}{\hbar^2 c} |\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{e}|^2 J(\omega_2 - \omega_1). \quad (32)$$

Таким образом, в рассматриваемом примере роль дельта-функции в (26) состоит в выделении из спектра частот возмущающего поля тех составляющих, частота которых достаточно близка к частоте перехода $\omega_2 - \omega_1 = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$.

Другой пример применения формулы (26) связан с задачей о переходах возмущаемой системы с начальной энергией ε_1 в любое состояние среди множества конечных состояний с непрерывным распределением энергии ε_2 . Пусть $\rho_f(\varepsilon_2)d\varepsilon_2$ – число таких состояний в интервале энергии $d\varepsilon_2$ вблизи значения $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \hbar\omega$. Обозначим: $\varepsilon_2 = \varepsilon_f$, $\varepsilon_1 + \hbar\omega = \varepsilon_i$ (величину ε_i можно интерпретировать как энергию начального состояния с учетом имеющегося «кванта» возмущающего поля с энергией $\hbar\omega$, при поглощении которого система переходит в конечное состояние с энергией ε_f). В этом случае полная вероятность переходов за единицу времени, просуммированная по всем указанным конечным состояниям, определяется равенством:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \int |M_{fi}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i) \rho_f(\varepsilon_f) d\varepsilon_f = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \rho_f(\varepsilon_i). \quad (33)$$

Формула (33) известна как золотое правило квантовой механики. Наличием дельта-функции в этом равенстве, очевидно, выражен закон сохранения энергии замкнутой системы.

9.11. Указанным в условии задачи потенциалам внешнего поля

$$\varphi = 0, \quad \mathbf{A}(t) = -(c\mathbf{E}/\omega) \sin \omega t \quad (1)$$

соответствует электрическое поле

$$\mathbf{E}(t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi = \mathbf{E} \cos \omega t. \quad (2)$$

С учетом энергии кулоновского взаимодействия электрона и ядра в атоме водорода, $U(r) = -e^2/r$, гамильтониан атома во внешнем поле (1) запишем в форме

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t) \right)^2 + U(r) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r) - \frac{e}{mc} \mathbf{A}(t) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2(t). \quad (3)$$

Здесь $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$, причем в правой стороне (3) мы учли, что $\nabla \cdot \mathbf{A}(t) = 0$. В линейном по внешнему полю приближении последним слагаемым в (3) пренебрегаем. Тогда

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad (4)$$

где $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + U(r)$ – невозмущенный гамильтониан атома, а оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V}(t) = \frac{ie\hbar}{mc} \mathbf{A}(t) \cdot \nabla = \frac{e\hbar \mathbf{E} \cdot \nabla}{2m\omega} e^{-i\omega t} - \frac{e\hbar \mathbf{E} \cdot \nabla}{2m\omega} e^{i\omega t}. \quad (5)$$

При $\omega > 0$ переходы с поглощением атомом энергии внешнего поля вызываются возмущением, которому соответствует первое слагаемое в правой стороне равенства (5). Матричный элемент перехода есть

$$M_{fi} = \frac{e\hbar}{2m\omega} \langle \psi_f | \mathbf{E} \cdot \nabla | \psi_i \rangle. \quad (6)$$

В рассматриваемой задаче $|\psi_i\rangle$ – это $1s$ -состояние электрона в атоме водорода; его волновая функция имеет вид:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad a = a_B = \hbar^2 / me^2. \quad (7)$$

Конечное состояние $|\psi_f\rangle$ приближенно описывается как состояние свободно движущегося электрона с тем или иным импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$:

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (8)$$

Направим ось z вдоль \mathbf{E} , то есть – параллельно направлению поляризации волны. Тогда $\mathbf{E}\cdot\nabla = E \partial / \partial z$, и матричный элемент (6) принимает вид

$$M_{fi} = \frac{e\hbar E}{2m\omega} \frac{1}{\sqrt{V\pi a^3}} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial z} e^{-r/a}. \quad (9)$$

Обозначив $1/a = \gamma$, приступим к вычислению присутствующего в (9) интеграла:

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial z} e^{-\gamma r} &= -\gamma \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{z}{r} e^{-\gamma r} = \\ &= -\gamma i \frac{\partial}{\partial k_z} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{r} e^{-\gamma r}. \end{aligned} \quad (10)$$

Для вычисления интеграла в правой стороне (10) воспользуемся сферической системой координат с полярной осью, параллельной вектору \mathbf{k} . Учитывая, что в такой системе координат $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = kr \cos\theta'$, $d^3\mathbf{r} = r^2 dr \sin\theta' d\theta' d\varphi'$, и обозначая $\cos\theta' = \eta$, имеем:

$$\int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{r} e^{-\gamma r} = 2\pi \int_0^\infty r dr e^{-\gamma r} \int_{-1}^1 d\eta e^{-ikr\eta} = \frac{4\pi}{k^2 + \gamma^2}. \quad (11)$$

Полученное выражение зависит от квадрата волнового вектора ($k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$) и, следовательно, имеет один и тот же вид в любой системе координат. Подстановка (11) в правую часть равенства (10) дает:

$$\int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial z} e^{-r/a} = \frac{8\pi i}{a(k^2 + a^{-2})^2} k_z. \quad (12)$$

Здесь $k_z = k \cos\theta$, θ – угол между направлениями импульса электрона $\hbar\mathbf{k}$ и внешнего электрического поля \mathbf{E} .

Равенство энергий конечного и начального состояния с учетом кванта $\hbar\omega$ энергии внешнего поля,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega - \frac{me^4}{2\hbar^2}, \quad (13)$$

при условии $\hbar\omega \gg Ry$ (напомним, что $Ry = me^4 / 2\hbar^2 = \hbar^2 / 2ma^2$) означает, что энергия электрона, вылетающего из атома под действием внешнего поля, очень велика в сравнении с порогом ионизации атома (Ry). Это позволяет с помощью равенства

$$k \approx \sqrt{2m\omega / \hbar} \quad (14)$$

всюду переходить к приближенным выражениям и, кроме того, пренебречь в знаменателе (12) величиной a^{-2} по сравнению с k^2 . В результате, для квадрата матричного элемента (9) получим:

$$|M_{fi}|^2 = \frac{2\pi}{V} \left(\frac{\hbar}{am\omega} \right)^5 e^2 E^2 \cos^2 \theta. \quad (15)$$

Найдем теперь плотность конечных состояний ρ_f в элементе \mathbf{p} -пространства

$$d^3 \mathbf{p} = p^2 dp d\Omega_{\mathbf{p}}, \quad (16)$$

где $d\Omega_{\mathbf{p}}$ – телесный угол, в котором находится импульс $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$ электрона, вылетевшего из атома. Учитывая, что $dp = (m/p) d\varepsilon_f$, и приравнивая число состояний $\rho_f d\varepsilon_f$ в элементе (16) величине $V d^3 \mathbf{p} / (2\pi\hbar)^3$,

$$\rho_f d\varepsilon_f = \frac{V d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V \hbar k m}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega_{\mathbf{p}} d\varepsilon_f, \quad (17)$$

получим:

$$\rho_f = \frac{V k m}{8\pi^3 \hbar^2} d\Omega_{\mathbf{p}}. \quad (18)$$

Подставим (15) и (18) в формулу золотого правила

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \rho_f. \quad (19)$$

Величина dw представляет собой вероятность перехода электрона за единицу

времени из атомного $1s$ -состояния в состояние движения вне атома с импульсом \mathbf{p} в телесном угле $d\Omega_{\mathbf{p}}$. Пользуясь равенством (14), находим:

$$\frac{dw}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{\omega_0}{\pi\sqrt{2}} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{9/2} \left(\frac{Ea^2}{e}\right)^2 \cos^2 \theta, \quad (20)$$

где $\omega_0 = me^4/\hbar^3$ – характерная атомная частота, e/a^2 – порядок величины напряженности электрического поля ядра, действующего на электрон в атоме водорода. Интегрирование выражения (20) по углам вылета электрона из атома с учетом

$$\int d\Omega_{\mathbf{p}} \cos^2 \theta = 4\pi/3 \quad (21)$$

дает полную вероятность ионизации атома за единицу времени:

$$w = \frac{2^{3/2}\omega_0}{3} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{9/2} \left(\frac{Ea^2}{e}\right)^2. \quad (22)$$

Полученные результаты можно рассматривать как приближенное описание *фотоэффекта* (ионизации атома светом) при полуклассическом подходе к задаче о взаимодействии в системе «атом + поле излучения». В полуклассическом подходе учитывается квантование лишь атомной системы, а электромагнитное поле рассматривается классическим образом. В последовательном же квантовом подходе учитывают и квантование поля (эти вопросы изучаются в курсах квантовой электродинамики и квантовой оптики). Применимость полуклассического метода к довольно широкому кругу задач о взаимодействии света с атомами обусловлена тем, что золотое правило квантовой механики для атомных переходов $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ включает закон сохранения энергии в такой форме, которая в случае поля излучения, характеризующегося определенной частотой $\omega > 0$, автоматически отвечает представлению о дискретных порциях энергии поля $\hbar\omega$:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \hbar\omega \text{ (поглощение фотона)}, \quad \varepsilon_2 + \hbar\omega = \varepsilon_1 \text{ (испускание фотона)}.$$

С этой точки зрения мы можем рассматривать каждый акт ионизации атома периодическим полем $\mathbf{E}(t)$ как результат поглощения атомным электроном фотона с энергией $\hbar\omega$. Плотность потока фотонов $j_{na\partial}$, «падающих» на атом со стороны источника монохроматического электромагнитного излучения, разумно определить соотношением

$$j_{na\partial} = I/\hbar\omega, \quad (23)$$

где $I = cE^2 / 8\pi$ – усредненная по времени плотность потока электромагнитной энергии. Тогда, разделив (20) и (22) на (23), найдем, соответственно, дифференциальное сечение процесса фотоионизации атома

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = 2^6 a^2 \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{Ry}{\hbar\omega} \right)^{7/2} \cos^2 \theta, \quad (24)$$

а также – полное сечение

$$\sigma = \frac{2^8 \pi}{3} a^2 \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{Ry}{\hbar\omega} \right)^{7/2}. \quad (25)$$

Эти формулы получены в предположении, что $\hbar\omega \gg Ry$, то есть – для случая, когда энергия фотона намного превышает красную границу фотоэффекта; при меньшем значении $\hbar\omega$ они дают завышенную величину вероятности. Для расчета сечения фотоэффекта вблизи красной границы необходимо конечные состояния электрона описывать не плоскими волнами, а точными волновыми функциями непрерывного энергетического спектра электрона в кулоновском поле ядра атома. Такой расчет дает при $\hbar\omega \geq Ry$ значение $\sigma \approx 31 a^2 e^2 / \hbar c$ (см., например, [10])

Еще один аспект приближений, использованных в проведенном рассмотрении, относится к формуле (6) для матричного элемента перехода. В ней не учтена зависимость внешнего поля от координат, которая должна была бы иметь вид $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$, где \mathbf{q} – волновой вектор электромагнитной волны. Это означает, что под интегралом в (9) величина $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ заменена единицей – первым членом ее ряда Тейлора по степеням $\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}$. Данное приближение оправдано при $qa \ll 1$ и называется *дипольным приближением*. Происхождение этого термина можно пояснить следующим образом.

Обозначим номерами 1 и 2 начальное и конечное состояния электрона, являющиеся собственными для невозмущенного гамильтониана атома \hat{H}_0 . Учитывая, что в нулевом приближении по внешнему полю

$$-i\hbar\nabla = \hat{\mathbf{p}} = m \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{\mathbf{r}}], \quad (26)$$

имеем равенство

$$\langle \psi_2 | \hat{\mathbf{p}} | \psi_1 \rangle = \frac{im}{\hbar} \left(\langle \hat{H}_0 \psi_2 | \hat{\mathbf{r}} | \psi_1 \rangle - \langle \psi_2 | \hat{\mathbf{r}} | \hat{H}_0 \psi_1 \rangle \right) = \frac{im(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\hbar} \langle \psi_2 | \hat{\mathbf{r}} | \psi_1 \rangle,$$

то есть

$$\langle \psi_2 | \hat{\mathbf{p}} | \psi_1 \rangle = im\omega_{21} \langle \psi_2 | \hat{\mathbf{r}} | \psi_1 \rangle, \quad \omega_{21} \equiv (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) / \hbar. \quad (27)$$

Как нам известно, для рассматриваемого перехода $1 \rightarrow 2$ частота внешнего поля и значения энергии электрона связаны соотношением

$$\omega = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar = \omega_{21}.$$

Следовательно, пользуясь формулой (27) для преобразования выражения (6), получим:

$$M_{21} = \frac{ie}{2m\omega} \langle \psi_2 | \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_1 \rangle = -\frac{1}{2} \langle \psi_2 | \mathbf{E} \cdot e\hat{\mathbf{r}} | \psi_1 \rangle = -\frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{d}_{21}, \quad (28)$$

где \mathbf{d}_{21} – матричный элемент оператора электрического дипольного момента атомной системы для перехода $1 \rightarrow 2$ (см. также формулу (29) в задаче 9.10).

Отметим, что применять в подобных расчетах матричные элементы оператора координат следует с определенной осмотрительностью, так как равенство (27) справедливо лишь при использовании в качестве ψ_1 и ψ_2 точных собственных функций гамильтониана атома \hat{H}_0 .

При обсуждении атомных переходов в рамках дипольного приближения полезно иметь ввиду правила отбора, сформулированные в задаче 9.4. Например, согласно правилу (11) указанной задачи следует ожидать, что из начального состояния s -типа ($l=0$, $m=0$) электрон под действием электромагнитной волны с линейной поляризацией в направлении \mathbf{e}_z может перейти лишь в состояние с $l'=1$, $m'=0$, которое, как известно, характеризуется распределением вероятностей вида $|Y_{10}|^2 \sim \cos^2 \theta$. Как раз такую угловую зависимость имеет величина (15), а с ней – и (20), (24).

9.12. Электрическое поле $\mathbf{E}(t)$, вращающееся с частотой ω вокруг оси z против часовой стрелки, можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(t) &= \mathbf{e}_x E \cos \omega t + \mathbf{e}_y E \sin \omega t = \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y) E e^{-i\omega t} + \frac{1}{2}(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y) E e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (1)$$

Матричный элемент M_{fi} перехода, сопровождающегося поглощением электроном в атоме кванта энергии $\hbar\omega$, связан с первым слагаемым в (1). Оно включает комплексный амплитудный вектор электрического поля

$$\mathbf{E} = (\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y) E. \quad (2)$$

В дипольном приближении должны выполняться соотношения пропорциональности

$$M_{fi} \sim \langle \psi_f | \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle \sim \langle \psi_f | \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{d}} | \psi_i \rangle . \quad (3)$$

С учетом (2) эти соотношения принимают вид

$$M_{fi} \sim E \langle \psi_f | (\partial/\partial x + i\partial/\partial y) | \psi_i \rangle \sim E \langle \psi_f | (x + iy) | \psi_i \rangle . \quad (4)$$

Вычисление матричного элемента $\langle \psi_f | (\partial/\partial x + i\partial/\partial y) | \psi_i \rangle$ для случая, когда ψ_i представляет собой s -состояние электрона в атоме водорода, а ψ_f имеет вид плоской волны, приведет, очевидно, к выражению, подобному результату (12) в задаче 9.11, но вместо множителя k_z оно будет содержать множитель

$$k_x + ik_y = k (\sin \theta \cos \varphi + i \sin \theta \sin \varphi) , \quad (5)$$

где θ и φ – углы вектора импульса $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ электрона, вылетающего из атома вследствие фотоэффекта. Эти углы отсчитываются в сферической системе координат с полярной осью z , параллельной направлению распространения электромагнитной волны. Таким образом, искомая угловая зависимость вероятности фотоэффекта в данных условиях определяется из соотношений:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} \sim |M_{fi}|^2 \sim |k_x + ik_y|^2 \sim \sin^2 \theta . \quad (6)$$

Найденная вероятность максимальна для направлений \mathbf{p} , параллельных плоскости, в которой вращается вектор электрического поля $\mathbf{E}(t)$ циркулярно поляризованной электромагнитной волны. При линейной поляризации волны вероятность фотоэффекта максимальна при \mathbf{p} , параллельном \mathbf{E} . Такая картина представляется вполне естественной.

Результат (6) соответствует правилу отбора (12), указанному в задаче 9.4. Исходя из этого правила следует ожидать, что электрон из начального состояния s -типа ($l = 0$, $m = 0$) под действием циркулярно поляризованной волны с амплитудным вектором (2) может переходить лишь в состояние с $l' = 1$, $m' = 1$, характеризующееся распределением вероятностей вида $|Y_{11}|^2 \sim \sin^2 \theta$. В случае волны с циркулярной поляризацией противоположной ориентации справедливы соотношения

$$\mathbf{E} = (\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y)E , \quad |M_{fi}|^2 \sim |k_x - ik_y|^2 \sim \sin^2 \theta . \quad (7)$$

При этом согласно правилу отбора (13) задачи 9.4 ожидаемым конечным состоянием будет состояние с $l' = 1$, $m' = -1$; для этого состояния угловое распределение вероятности обнаружения электрона вне атома имеет прежний

вид: $|Y_{1,-1}|^2 \sim \sin^2 \theta$. Перечисленные правила отбора для квантового числа $m \equiv l_z$ электронных состояний находятся в согласии с представлением о том, что фотон в состояниях с циркулярной поляризацией обладает моментом импульса $J_z = \pm 1$ (где z – направление распространения фотона). Такое представление о фотоне мы обсуждали в задаче 3.9.

9.13. Потенциал, создаваемый двумя одинаковыми силовыми центрами, находящимися на расстоянии \mathbf{d} друг от друга есть

$$U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) + U_0(\mathbf{r} - \mathbf{d}), \quad (1)$$

где $U_0(\mathbf{r})$ – потенциал одного центра. Обозначим компоненту Фурье для функции $U_0(\mathbf{r})$ посредством $u_0(\mathbf{q})$:

$$u_0(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U_0(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Вычисляя компоненту Фурье для $U_0(\mathbf{r} - \mathbf{d})$, произведем замену переменных $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{d}$:

$$\int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U_0(\mathbf{r} - \mathbf{d}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r} + \mathbf{d})} U_0(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}} u_0(\mathbf{q}). \quad (3)$$

Фурье-компонента $u(\mathbf{q})$ суммарного потенциала (1) равна сумме компонент Фурье каждого из слагаемых этого потенциала:

$$u(\mathbf{q}) = u_0(\mathbf{q}) + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}} u_0(\mathbf{q}) = u_0(\mathbf{q}) (1 + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}}). \quad (4)$$

Подставив правую часть равенства (4) в формулу Борна (см. формулу (XX) введения к данной главе), найдем искомое сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |u_0(\mathbf{q})|^2 2(1 + \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{d}), \quad (5)$$

где $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$ – импульс, получаемый электроном в акте упругого рассеяния (\mathbf{p}' и \mathbf{p} – векторы импульса электрона в начальном и конечном состояниях, соответственно).

Имеющееся в (5) слагаемое, пропорциональное $\cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{d}$, придает найденному сечению рассеяния *интерференционный* характер. Этот результат на качественном уровне уже был получен нами ранее с помощью наглядных соображений о «волновых свойствах» частиц (см. задачу 2.3). Теперь мы убеждаемся в его справедливости на основе последовательной квантовой

теории. Кроме того, здесь мы находим количественное определение использованному в задаче 2.3 представлению об амплитуде рассеяния $f(\mathbf{q})$ (различие в знаке при выборе определения вектора \mathbf{q} в обеих задачах не играет принципиальной роли). Согласно формуле Борна амплитуда рассеяния $f(\mathbf{q})$ с точностью до фазового множителя равна величине $(m/2\pi\hbar^2)u(\mathbf{q})$, связанной с рассеивающим потенциалом $U(\mathbf{r})$ преобразованием Фурье.

9.14. Для определения компоненты Фурье $u(\mathbf{q})$ кулоновского потенциала $U(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r$ применим формулу (11) из задачи 9.11

$$\int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{r} e^{-\gamma r} = \frac{4\pi}{q^2 + \gamma^2}, \quad (1)$$

перейдя в ней к пределу при $\gamma \rightarrow 0$; получаем:

$$u(\mathbf{q}) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{q^2}. \quad (2)$$

Подставив (2) в формулу Борна

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |u(\mathbf{q})|^2, \quad (3)$$

находим:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4(Z_1 Z_2 e^2)^2 m^2}{(\hbar q)^4}. \quad (4)$$

Выразим найденное сечение рассеяния через угол θ между начальным вектором импульса \mathbf{p}' рассеиваемой частицы и конечным \mathbf{p} . С этой целью заметим, что

$$\begin{aligned} (\hbar q)^2 &= (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 = \mathbf{p}^2 + \mathbf{p}'^2 - 2\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' = \\ &= p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta. \end{aligned} \quad (5)$$

При рассеянии частицы в не зависящем от времени поле условие равенства энергий начального и конечного состояний ($\varepsilon_{\mathbf{p}'} = \varepsilon_{\mathbf{p}}$) приводит к равенству $p' = p$. Поэтому выражение в правой стороне (5) есть

$$(\hbar q)^2 = 2p^2(1 - \cos \theta) = 8m\varepsilon \sin^2(\theta/2), \quad (6)$$

где $\varepsilon = p^2 / 2m = p'^2 / 2m$ – энергия частицы «на бесконечности» (в области приближенно свободного движения). С учетом (6) формула (4) принимает вид:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\varepsilon} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \quad (7)$$

Можно показать [1], что при рассеянии частицы в кулоновском поле результат (7) справедлив и вне рамок борновского приближения, то есть он является точным. Формула (7) совпадает со знаменитой *формулой Резерфорда*, к которой приводит такая же задача о рассеянии в классической механике.

9.15. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_p + \hat{V}, \quad (1)$$

где \hat{H}_a – гамильтониан атома (atom), содержащего Z электронов и ядро с зарядом $Z|e|$, \hat{H}_p – гамильтониан свободной частицы (particle) – электрона, падающего на атом из внешнего источника, \hat{V} – энергия кулоновского взаимодействия падающего на атом электрона с имеющимися внутри атома электронами и ядром. Эту энергию взаимодействия,

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}|}, \quad (2)$$

будем рассматривать в качестве возмущения. В выражении (2) \mathbf{r} – координаты падающего на атом электрона, \mathbf{r}_i – координаты электронов в атоме; ядро предполагается покоящимся в начале координат. Взаимодействием спинов мы пренебрегаем, так что спиновые состояния атома и рассеиваемого электрона считаются не изменяющимися в ходе взаимодействия, и в дальнейшем мы о спиновых состояниях упоминать не будем. Кроме того, пренебрежем обменными эффектами между падающим на атом быстрым электроном и атомными электронами (то есть в процессе расчета мы не будем проводить антисимметризацию многоэлектронного состояния системы в целом); это оправдывается тем, что когда дебройлевская длина волны рассеиваемого электрона мала в сравнении с размером атома, «обменные интегралы» из-за сильно осциллирующего характера волновой функции падающего электрона дают в вероятность переходов пренебрежимо малый вклад.

Пусть в начальном состоянии электрон, находящийся на большом расстоянии от атома, движется с импульсом \mathbf{p}' по направлению к атому, пребывающему в стационарном состоянии n' . Строго говоря, такое состояние

электрона следовало бы описывать волновым пакетом, однако при использовании вместо волнового пакета обычной плоской волны, как выясняется, те же самые результаты для вероятности переходов будут получены путем гораздо менее громоздких вычислений. Таким образом, запишем начальное состояние $|i\rangle$ всей системы в виде

$$|i\rangle = |\mathbf{p}'\rangle \otimes |n'\rangle, \quad (3)$$

где $|\mathbf{p}'\rangle$ – начальное состояние падающего на атом электрона с энергией $\varepsilon_{\mathbf{p}'} = p'^2 / 2m$, описываемое волновой функцией $V^{-1/2} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}$; $|n'\rangle$ – начальное состояние атома, n' – полный набор квантовых чисел, характеризующих стационарное состояние электронной системы атома с энергией $E_{n'}$ и волновой функцией $\psi_{n'}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z)$.

По прошествии некоторого времени рассеиваемый электрон испытывает взаимодействие с атомом и затем может быть обнаружен снова вдали от атома как частица, свободно движущаяся с тем или иным импульсом \mathbf{p} и энергией $\varepsilon_{\mathbf{p}} = p^2 / 2m$. К этому же времени атом может быть обнаружен в стационарном состоянии $|n\rangle$, не обязательно совпадающем с начальным состоянием. Например, если начальным является основное состояние атома, то в результате взаимодействия с падающим извне электроном атом с определенной вероятностью перейдет в одно из возбужденных состояний, или будет ионизован, или так и останется в основном состоянии. Амплитуды вероятности $c_{\mathbf{p},n}(t)$ всех подобных событий определяются вектором состояния системы $|\psi(t)\rangle$. Его эволюция подчинена волновому уравнению Шредингера,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

с гамильтонианом (1), включающим оператор взаимодействия (2), причем начальным условием служит равенство $|\psi(t_{нач})\rangle$ начальному вектору состояния (3). Амплитуды вероятности $c_{\mathbf{p},n}(t)$ являются коэффициентами разложения конечного вектора состояния $|\psi(t)\rangle$,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\mathbf{p}} \sum_n c_{\mathbf{p},n}(t) |\mathbf{p}\rangle \otimes |n\rangle,$$

по базисным состояниям вида

$$|f\rangle = |\mathbf{p}\rangle \otimes |n\rangle. \quad (4)$$

Не повторяя известный вывод формул для вероятностей переходов в первом приближении теории возмущений, сразу воспользуемся золотым правилом, согласно которому вероятность перехода $i \rightarrow f$ за единицу времени есть

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \rho_f(\varepsilon_i), \text{ где } \varepsilon_i = \varepsilon_f. \quad (5)$$

Условие равенства энергий конечного и начального состояний всей системы ($\varepsilon_f = \varepsilon_i$ – закон сохранения энергии) в рассматриваемой задаче имеет вид:

$$p^2/2m + E_n = p'^2/2m + E_{n'}. \quad (6)$$

Матричный элемент перехода $i \rightarrow f$ в первом приближении теории возмущений вычисляется по волновым функциям состояний (3) и (4) с учетом выражения для оператора возмущения (2):

$$\begin{aligned} M_{fi} &= \langle f | \hat{V} | i \rangle = \\ &= \frac{1}{V} \int d^3\mathbf{r} \int \left(\prod_{i=1}^Z d^3\mathbf{r}_i \right) \psi_n^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z) \psi_{n'}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left(\sum_{i=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} - \frac{Ze^2}{r} \right). \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\mathbf{q} = (\mathbf{p} - \mathbf{p}') / \hbar. \quad (8)$$

Ограничимся рассмотрением процессов упругого рассеяния. Столкновение частиц называется *упругим*, если в процессе столкновения не происходит превращения исходных частиц в новые частицы и не меняется внутреннее состояние сталкивающихся частиц. Применительно к соударениям электрона с атомом это определение означает, что в акте упругого взаимодействия электрона и атома меняется только вектор импульса рассеиваемого электрона, а квантовое состояние атома остается неизменным:

$$n = n'. \quad (9)$$

Из равенства (6) при этом следует, что энергия электрона и величина его импульса не меняются при упругом рассеянии:

$$p = p'. \quad (10)$$

Изменяется лишь направление импульса рассеиваемого электрона.

Матричный элемент (7) можно представить в виде

$$M_{fi} = u(\mathbf{q})/V, \quad (11)$$

где с учетом (9)

$$u(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \int \left(\prod_{i=1}^Z d^3\mathbf{r}_i \right) |\psi_{n'}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z)|^2 \left(\sum_{i=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} - \frac{Ze^2}{r} \right). \quad (12)$$

Плотность конечных состояний электрона с направлением импульса \mathbf{p} внутри телесного угла $d\Omega_{\mathbf{p}}$ есть

$$\rho_f = \frac{V p m}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega_{\mathbf{p}}. \quad (13)$$

Подставив (11) и (13) в (5), получим

$$w = \frac{1}{V} \frac{p m}{(2\pi\hbar^2)^2} |u(\mathbf{q})|^2 d\Omega_{\mathbf{p}}. \quad (14)$$

Поскольку это выражение содержит нормировочный объем V волновой функции электрона, целесообразно рассматривать вместо вероятности перехода в единицу времени дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma = w / j_{na\partial}$, где $j_{na\partial}$ – плотность потока падающих на атом электронов в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi_{\mathbf{p}'} = V^{-1/2} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}$:

$$j_{na\partial} = \frac{p'}{m} |\psi_{\mathbf{p}'}|^2 = \frac{p}{mV}. \quad (15)$$

Разделив (14) на (15), приходим к формуле Борна

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |u(\mathbf{q})|^2, \quad (16)$$

показывающей, что сечение рассеяния в данной задаче определяется величиной (12). Рассмотрим эту величину внимательнее.

Используя условие нормировки волновой функции атомных электронов на единицу,

$$\int \left(\prod_{i=1}^Z d^3\mathbf{r}_i \right) |\psi_{n'}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z)|^2 = 1,$$

и вспоминая известное выражение для компоненты Фурье кулоновского потенциала (см. формулу (2) задачи 9.14), можем сразу найти вклад последнего слагаемого под знаками интегралов в (12), соответствующего взаимодействию

рассеиваемого электрона с ядром атома:

$$\int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left(-\frac{Ze^2}{r} \right) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} Z. \quad (17)$$

Далее, заметим, что зависящая от \mathbf{r}_j величина

$$\int \left(\prod_{i \neq j} d^3\mathbf{r}_i \right) |\Psi_{n'}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_Z)|^2 \quad (18)$$

представляет собой плотность вероятности обнаружить один из атомных электронов около точки \mathbf{r}_j . Введем в рассмотрение полную *плотность электронов* $n(\mathbf{r})$ атома в заданном состоянии $|n'\rangle$, определив эту функцию формулой

$$n(\mathbf{r}_j) = Z \int \left(\prod_{i \neq j} d^3\mathbf{r}_i \right) |\Psi_{n'}|^2. \quad (19)$$

Тогда (12) примет вид

$$\begin{aligned} u(\mathbf{q}) &= -\frac{4\pi e^2}{q^2} Z + \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{j=1}^Z \frac{1}{Z} \int d^3\mathbf{r}_j \frac{e^2 n(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} = \\ &= -\frac{4\pi e^2}{q^2} Z + \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \int d^3\mathbf{r}' \frac{e^2 n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \end{aligned} \quad (20)$$

где мы учли, что интеграл по координатам электрона с номером j не зависит от этого номера. Воспользуемся снова выражением для компоненты Фурье кулоновского потенциала, поменяв в правой стороне (20) порядок интегрирования и сделав замену $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$:

$$\int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \int d^3\mathbf{R} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \frac{1}{|\mathbf{R}|} = e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \frac{4\pi}{q^2}. \quad (21)$$

С учетом (21) выражение (20) запишется в форме

$$u(\mathbf{q}) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} Z + \frac{4\pi e^2}{q^2} \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} n(\mathbf{r}'). \quad (22)$$

Введем в рассмотрение компоненту Фурье $F(\mathbf{q})$ плотности атомных

электронов $n(\mathbf{r})$:

$$F(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} n(\mathbf{r}) . \quad (23)$$

Величина (23) называется *атомным формфактором*. При этом мы получаем окончательное выражение для функции (22):

$$u(\mathbf{q}) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} (Z - F(\mathbf{q})) . \quad (24)$$

Величину q^2 можно записать как $q^2 = (8m\varepsilon/\hbar^2)\sin^2(\theta/2)$, где θ – угол рассеяния электрона, m – масса электрона, ε – энергия рассеиваемого электрона (энергия на бесконечности). Таким образом, дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов атомом, найденное в борновском приближении (по формуле (16)), имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{4m^2 e^4}{(\hbar q)^4} |Z - F(\mathbf{q})|^2 = \left(\frac{e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} |Z - F(\mathbf{q})|^2 . \quad (25)$$

Для атома характерная величина потенциала $|U|$ и кинетическая энергия электронов имеют порядок \hbar^2/ma^2 , где a – порядок величины размера атома. Поэтому условие применимости борновского приближения здесь сводится к неравенству $pa/\hbar \gg 1$, означающему, что скорость рассеиваемого электрона должна быть велика по сравнению со скоростями электронов в атоме.

В области достаточно больших углов рассеяния, при $qa \gg 1$, атомный формфактор мал, так как множитель $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ в подынтегральном выражении (23) является быстро осциллирующей функцией. Пренебрегая в (25) величиной $F(\mathbf{q})$ по сравнению с Z , приходим к формуле Резерфорда для сечения рассеяния быстрых электронов ядром атома.

В области малых углов рассеяния, при $qa \ll 1$, следует разложить (23) в ряд по степеням \mathbf{q} , полагая

$$e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 1 - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - (\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})^2/2 + \dots . \quad (26)$$

С учетом определения (19) и условия нормировки волновой функции атомных электронов на единицу член нулевого порядка дает:

$$F(0) = \int d^3\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = Z \int \left(\prod_{i=1}^Z d^3\mathbf{r}_i \right) |\psi_{n'}|^2 = Z . \quad (27)$$

Этого приближения не достаточно для вычисления (25). Член первого порядка

пропорционален дипольному электрическому моменту атома; при отсутствии зависимости функции $n(\mathbf{r}) = n(r)$ от углов дипольный момент атома заведомо обращается в нуль:

$$\int d^3\mathbf{r} \mathbf{r} n(r) = 0 . \quad (28)$$

Неисчезающий вклад в (25) дает член второго порядка; с учетом равенства

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})^2 = \frac{1}{3} q^2 r^2 \quad (29)$$

находим

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \left(\frac{1}{3a_B} \int d^3\mathbf{r} r^2 n(r) \right)^2 . \quad (30)$$

Таким образом, в области малых углов сечение упругого рассеяния электронов атомом не зависит от угла рассеяния и определяется средним квадратом расстояния атомных электронов от ядра.

В заключение найдем по формуле (25) сечение упругого рассеяния быстрых электронов на атоме водорода в основном состоянии [1,8].

Волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид:

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} , \quad (31)$$

где $a = a_B$. «Плотность электронов» с учетом того, что $Z = 1$, есть

$$n(r) = |\psi_0|^2 = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a} . \quad (32)$$

Вычисление атомного формфактора (23) с функцией (32) дает:

$$F(q) = \frac{1}{\pi a^3} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - 2r/a} = \frac{16}{(4 + q^2 a^2)^2} . \quad (33)$$

Подставляя (33) в (25), получаем:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = a^2 \frac{4(8 + q^2 a^2)^2}{(4 + q^2 a^2)^4} , \quad a = a_B . \quad (34)$$

С учетом условия применимости борновского приближения ($ka \gg 1$, где $k = p/\hbar$) полное сечение рассеяния, как можно убедиться, равно

$$\sigma \approx a^2 \frac{7\pi}{3(ka)^2} . \quad (35)$$

Отметим, что результат (34) можно получить непосредственно по формуле (16), если под $u(\mathbf{q})$ понимать компоненту Фурье поля

$$U(\mathbf{r}) = - \left(\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{a} \right) e^{-2r/a} . \quad (36)$$

Такая форма энергии взаимодействия рассеиваемого электрона с атомом водорода отвечает наличию эффективного электростатического потенциала $\varphi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})/e$. Согласно уравнению Пуассона, это соответствует распределению плотности заряда в атоме водорода вида

$$\rho(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \Delta\varphi(\mathbf{r}) = |e| \delta(\mathbf{r}) + e |\psi_0(\mathbf{r})|^2 , \quad (37)$$

где $\psi_0(\mathbf{r})$ – волновая функция атомного электрона (31). Первый член в правой стороне (37), очевидно, описывает точечное ядро, а второй – электронное «облако» атома водорода. Соотношение (12) приводит к аналогичному выводу и в общем случае: в рассматриваемой задаче об упругом рассеянии электронов на атоме электрически нейтральному атому с Z электронами в заданном стационарном состоянии можно сопоставить эффективное распределение плотности заряда

$$\rho(\mathbf{r}) = Z|e| \delta(\mathbf{r}) + e n(\mathbf{r}) , \quad (38)$$

равное сумме вкладов точечного ядра и окружающего ядро облака атомных электронов.

Библиографический список

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2001. 803 с.
2. Дирак П. Принципы квантовой механики. М.: Наука, 1979. 480 с.
3. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука, 1973. 703 с.
4. Соколов А.А., Тернов И.М. Квантовая механика и атомная физика. М.: Просвещение, 1970. 424 с.
5. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Квантовая механика. Вып. 8, 9. М.: Мир, 1976. 524 с.
6. Фейнмановские лекции по физике. Задачи и упражнения с ответами и решениями / Под общ. ред. А.П. Леванюка. М.: Мир, 1969. 626 с.
7. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974. Т. 1 - 2.
8. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. М.: Едиториал УРСС, 2001. Ч. 1 - 2.
9. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика с задачами. М.: Физматлит; УНЦ довузовского образования МГУ, 2001. 304 с.
10. Бете Г., Квантовая механика. М.: Мир, 1965. 333 с.
11. Лыков С.Н., Квантовая механика. СПб, изд-во СПбГТУ, 2001. 149 с.
12. Лыков С.Н., Гасумянц В.Э., Рыков С.А., Квантовая механика. Руководство по решению задач. Часть I. СПб, изд-во СПбГПУ, 2003. 108 с.

СПИСОК ОПЕЧАТОК И ИСПРАВЛЕНИЙ

К учебному пособию С.Н.Лыков. Квантовая механика. СПб, изд-во СПбГТУ, 2001 [11]

- Стр. 40, формула (2.74) должна иметь вид $\hat{T}(a)^+ = \hat{T}(a)^{-1}$.
- Стр. 81, строка 6 сверху, вместо (3.53) должно быть (3.54).
- Стр. 86, в формуле (3.82) вместо H_3 должно быть H_2 .
- Стр. 95, строка 8 сверху, должно быть «ясно, что».
- Стр. 98, формула (4.42) должна иметь вид $\langle \mathbf{J} \rangle = e_x \langle J_x \rangle + e_y \langle J_y \rangle + e_z \langle J_z \rangle$.
- Стр. 134, строка 4 сверху, вместо t должно быть $t - t'$.
- Стр. 134, в формуле (6.27) в показателе экспоненты под знаком второго интеграла вместо t должно быть t_1 .
- Стр. 132, в формуле (6.12) и в предыдущем предложении в показателях экспонент пропущен множитель $1/\hbar$.
- Стр. 136, строка 13 снизу, должно быть «частицы из».

К учебному пособию С.Н.Лыков, В.Э.Гасумяни, С.А.Рыков. Квантовая механика. Руководство по решению задач. Часть I. СПб, изд-во СПбГПУ, 2003 [12]

- Стр. 15, строка 5 сверху, должно быть «для электрона он приблизительно равен 1.00116, причем μ – отрицательная величина».
- Стр. 38, строка 13 сверху, должно быть « ψ_1 и ψ_2 ».
- Стр. 55, строка 8 сверху, должно быть «поглощаются».
- Стр. 63, строка 6 сверху, должно быть «рис. 3.4 иллюстрирует».
- Стр. 80, строка 1 сверху, должно быть «то есть»
- Стр. 86, строка 1 сверху, вместо (11) должно быть (12).
- Стр. 92–93, в формулах (1), (3) и (4) вместо $\mathbf{r}(t)$ должно быть \mathbf{r}' .
- Стр. 97, строка 13 сверху, должно быть $dW(\mathbf{r}) = |\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 dV = dV/V$.
- Стр. 97, строка 18 сверху, должно быть «одно и то же».
- Стр. 102, строка 1 сверху, должно быть «то решение».
- Стр. 104, в формуле (8) должно быть $B_n = A_n e^{q_n a} \sin k_n a$.