

О.П.КОБУШКІН

КВАНТОВА МЕХАНІКА

Навчальний посібник

Київ
2016

Викладено основні положення та методи квантової механіки, її застосування до ряду фізичних проблем відповідно до навчальної програми дисципліни “Квантова механіка”. Для студентів фізико-технічних спеціальностей. Також може бути корисним широкому колу інших фахівців.

ПЕРЕДМОВА

Цей посібник розрахований на широке коло читачів – студентів, викладачів та наукових співробітників – усіх, хто бажає познайомитись з надзвичайно важливою і цікавою наукою – *квантовою механікою*.

Метою автора було висвітлення, у простій та доступній формі, основних положень та методів квантової механіки, її застосування до розв'язання ряду важливих фізичних задач.

Курс квантової механіки читається після курсу атомної фізики, де студенти знайомляться з основними експериментальними фактами, які обумовлюють необхідність переходу від класичної фізики до квантової, та головними принципами квантової механіки. Зокрема вважається, що читач вже знайомий з такими фундаментальними положеннями, як корпускулярно-хвильовий дуалізм, принцип невизначеності Гайзенберга та ін. Тому їх, як і питання обґрунтування квантової механіки, ми не обговорюємо детально.

Для засвоєння матеріалу необхідно знати основні розділи загальної фізики, класичної теоретичної механіки, класичної електродинаміки, математичного аналізу, диференціальних рівнянь та головні положення теорії функцій комплексних змінних.

Безумовно, що вивчення даного предмету не може йти без розв'язання задач. Деякі з задач оригінальні, проте більшість з них взято з відомих підручників [7] та [8]. Для тих, хто хоче глибше закріпити свої знання можна запропонувати задачі підвищеного рівня складності з книги [10].

Автор висловлює щиру подяку керівництву Інституту теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова НАНУ за підтримку під час роботи над даним посібником.

ЗМІСТ

ВСТУП	8
РОЗДІЛ 1. ГОЛОВНІ ПОЛОЖЕННЯ	
1.1. Лінійні оператори	12
1.2. Зв'язок операторів з фізичними величинами. Квантові дужки Пуассона	17
1.3. Рівняння Шрödінгера	22
Задачі	25
РОЗДІЛ 2. КВАЗІКЛАСИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ	
2.1. Квазікласичний розклад рівняння Шрödінгера	29
2.2. Хвильова функція в квазікласичному наближенні	30
2.3. Умова допустимості квазікласичного наближення	33
2.4. “Зшивання” хвильової функції в точках повороту. Випадок фінітного руху	35
2.5. Випадок інфінітного руху. Тунельний ефект	38
Задачі	42
РОЗДІЛ 3. ТЕОРІЯ ПРЕДСТАВЛЕНЬ	
3.1. Матрична форма квантової механіки	44
3.2. Вектор стану як вектор в гільбертовому просторі	47
3.3. Неперервні матриці	50
3.4 Вектори “кет” і “бра”	51
3.5. Зміна стану з часом	56
3.5.1. Представлення Шрödінгера	56
3.5.2. Представлення Гайзенберга	56
3.5.3. Представлення взаємодії	57
Задачі	59
РОЗДІЛ 4. ОПЕРАТОР МОМЕНТУ КІЛЬКОСТІ РУХУ В МАТРИЧНОМУ ПРЕДСТАВЛЕНІ	
4.1. Знаходження матричних елементів компонент оператора моменту кількості руху	60
4.2. Матричні елементи компонент оператора моменту для $j=1$	66
4.3. Матричні елементи компонент оператора моменту для $j=1/2$. Матриці Паулі	67
4.4. Властивості спінів	68
Задчі	72
РОЗДІЛ 5. КВАНТОВА ЧАСТИНКА В ЦЕНТРАЛЬНОМУ ПОЛІ	

5.1. Радіальне рівняння Шрьодінгера	73
5.2. Знаходження енергетичних рівнів і хвильових функцій атома водню	77
5.3. Густина розподілу електронної “хмари” в атомі водню	82
5.4. Хвильові функції неперервного спектра для електрона в кулонівському полі	84
Задачі	84

РОЗДІЛ 6. НАБЛИЖЕНІ МЕТОДИ РОЗВ’ЯЗАННЯ СТАЦІОНАРНОГО РІВНЯННЯ ШРЬОДІНГЕРА

6.1. Теорія збурень. Випадок дискретного спектра без виродження	86
6.2. Теорія збурень для двох або більше близьких рівнів	89
6.3. Адіабатична теорія збурень	92
6.4. Варіаційний метод Рітца	95
Задачі	98

РОЗДІЛ 7. ЕЛЕКТРОН У ЗОВНІШНЬОМУ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ

7.1. Нерелятивістський класичний гамільтоніан для частинки в зовнішньому електромагнітному полі	100
7.2. Рівняння Паулі	101
7.3. Калібровочна інваріантність	105
7.4. Електрон в однорідному магнітному полі	106
7.5. Атом в зовнішньому магнітному полі	107
7.5.1. Ефект Зеємана	107
7.5.2. Магнітна сприйнятливність	109
7.5.3. Рівні Ландау	111
7.6. Ефект Штарка	112
7.6.1. Якісний розгляд ефекту Штарка	112
7.6.2. Лінійний ефект Штарка	114
7.6.3. Квадратичний ефект Штарка	118
Задачі	120

РОЗДІЛ 8. НЕСТАЦІОНАРНА ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ

8.1. Розрахунок ймовірності переходу	122
8.2. Переходи під дією збурення, яке змінюється по гармонічному закону	126
8.3. Ймовірність електромагнітних переходів частинки без спіну	128

8.4. Вимушене та спонтанне випромінювання світла	132
8.5. Правила відбору дипольних електромагнітних переходів	133
8.6. Квадрупольні та магнітні переходи	135
8.7. Час життя збудженого стану	137
Задачі	141

РОЗДІЛ 9. СИСТЕМИ БАГАТЬОХ ЧАСТИНОК

9.1. Система тотожних частинок. Зв'язок спіна із статистикою	143
9.2. Схеми Юнга	146
9.3. Розрахунок енергії атома з багатьма електронами методом Хартрі-Фока	149
9.3.1. Самоузгоджене поле. Метод Хартрі	150
9.3.2. Врахування принципу Паулі	152
Задачі	154

РОЗДІЛ 10. МЕТОД ВТОРИННОГО КВАНТУВАННЯ

10.1. Метод вторинного квантування системи тотожних бозонів	156
10.1.1. Оператори народження, знищення і числа частинок	156
10.1.2. Стан багатьох частинок	158
10.1.3. Оператори фізичних величин	160
10.2. Вторинне квантування для ферміонів	163
10.3. Гармонічний осцилятор	164
Задачі	167

РОЗДІЛ 11. КВАНТОВА ТЕОРІЯ РОЗСІЯННЯ

11.1. Пружне розсіяння частинок без спіну	169
11.2. Функція Гріна для вільної частинки	171
11.3. Амплітуда розсіяння і диференціальний переріз пружного розсіяння	173
11.4. Непружне розсіяння частинок	174
11.5. Розрахунок амплітуди розсіяння за теорією збурень	178
11.6. Метод парціальних хвиль	182
11.7. Принцип тотожності частинок в задачі розсіяння	186
11.7.1. Пружне розсіяння частинок з нульовим спіном	186
11.7.2. Пружне розсіяння двох частинок зі спіном 1/2	188
Задачі	190

РОЗДІЛ 12. ОСНОВИ РЕЛЯТИВІСТСЬКОЇ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

12.1. Рівняння Клейна-Гордона-Фока	191
12.1.1. Релятивістськи-інваріантний запис рівняння Клейна-Гордона-Фока	192
12.1.2. Плосько-хвильові розв'язки рівняння	194
12.2. Рівняння Дірака	197
12.2.1. Обґрунтування рівняння	197
12.2.2. Рівняння неперервності	200
12.2.3. Релятивістськи-інваріантна форма рівняння Дірака	201
12.2.4. Коваріантні структури в теорії Дірака	202
12.2.5. Розв'язок для вільної діраковської частинки в системі спокою	203
12.2.6. Нерелятивістське наближення для рівняння Дірака	204
12.2.7. Інтерпретація розв'язків з негативною енергією. Відкриття позитрона	208
Задачі	209
Відповіді та розв'язки задач	211
Додаток. Важливі математичні формули	248
Література	253

ВСТУП

На початку минулого сторіччя фізика приступила до вивчення речовини на атомних масштабах. Одразу було з'ясовано, що стара, або, як її зараз називають, класична фізика принципово не може бути застосована до процесів, що відбуваються на такому рівні. Виявилось, що процеси випромінювання і поглинання світла атомами та молекулами, будова атомів та молекул, властивості електронів та інші явища знаходяться у протиріччі з класичними представленнями про будову речовини. Тому виникла потреба створення нового апарату фізики. Зараз цей апарат називають квантовою механікою.

Важливо, що квантова механіка виникла з конкретних потреб експериментальної та теоретичної фізики при її переході на принципово новий рівень дослідження природи.

При розробці квантової механіки фізики одразу зіткнулися з рядом досить незвичних (з точки зору класичної фізики) обставин. Зокрема, незважаючи на те, що хвильова природа світла знаходила блискуче підтвердження у дослідах по дифракції та інтерференції світла, для пояснення випромінювання абсолютно чорного тіла (М.Планк) та опису фотоефекту (А.Ейнштейн) довелося допустити, що світло випромінюється, поглинається та поширюється певними порціями, квантами. Таким чином світло проявляє властивості частинки. Ці частинки прийнято називати *фотонами*. Як і будь-яка інша частинка фотони характеризуються енергією та імпульсом.

Енергія квантів світла E пов'язана з його частотою ν та визначається за *формулою Планка*

$$E = h\nu,$$

де $h \approx 6,626 \times 10^{-34}$ Дж·с - *стала Планка*. Переходячи до *кругової частоти* $\omega = 2\pi\nu$ формулу Планка можна переписати як

$$E = \hbar\omega. \quad (0.1)$$

Тут $\hbar \equiv h / (2\pi) \approx 1,054 \times 10^{-34}$ Дж·с так звана редукована стала Планка. Надалі в більшості випадків будемо мати справу саме з нею і для простоти будемо її теж називати сталою Планка.

Імпульс фотона теж виражається через сталу Планка

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad (0.2)$$

де \vec{k} – хвильовий вектор, тобто вектор, довжина якого дорівнює хвильовому числу $k = \frac{\omega}{c}$; (c – швидкість світла) і який направлений вздовж розповсюдження хвилі.

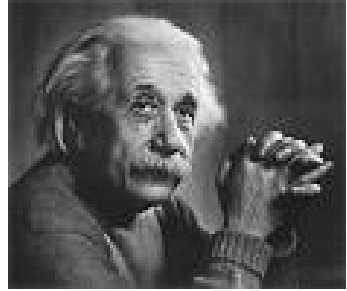
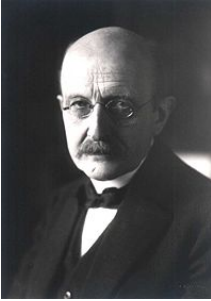


Рис. 1. Макс Планк (ліворуч) та Альберт Ейнштейн (праворуч), одні з творців квантової механіки.

Ситуація, коли один і той самий представник мікросвіту проявляє як хвильові властивості, так і властивості частинки, (*корпускулярно-хвильовий дуалізм*) є загальною рисою квантового світу. Так, у досліджах було доведено існування дифракційної картини для електронів, нейтронів, атомів та молекул. Хвильовий вектор та довжина хвилі, що виникають при русі цих частинок, визначаються формулою, яка виходить з теорії де Бройля

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} = \frac{h}{|\vec{p}|}. \quad (0.3)$$

Величину λ називають де-Бройлевською довжиною хвилі частинки.

У квантовій механіці зникає цілий ряд понять, якими оперує класична фізика. Так, *принцип невизначеності* Гайзенберга призводить до того, що у квантовому світі втрачається поняття траєкторії руху частинки. Можна лише говорити про найбільш ймовірну траєкторію.

Треба також пам'ятати, що квантова механіка дає лише передбачення про ймовірності процесів. Так, вона в принципі не може сказати, як буде себе вести той чи інший збуджений атом, але може передбачити, яка частина ансамблю збуджених атомів за певний час перейде в стан з нижчим значенням енергії висвітлюючи при цьому квант світла.

Квантова механіка необхідна не тільки для розуміння процесів, що відбуваються у атомних системах. Вона знаходить застосування при описі молекул, хімічних зв'язків, хімічних реакцій, кристалів, ядер, елементарних частинок, у астрофізиці, біофізиці тощо.

Курс квантової механіки читається після курсу атомної фізики, де дається досить повний перелік фактів, які визначили необхідність переходу до квантового опису природи. Тому надалі не будемо їх детально обговорювати. Нашою метою буде ознайомлення з методами квантової механіки, які дозволяють розраховувати енергетичні спектри квантових систем, їх взаємодію, переходи та розсіяння квантових об'єктів. Тому



Рис. 2. Луї де Бройль, встановив хвильові властивості електрона.

починаємо з викладення основ математичного апарату квантової механіки, яким є теорія лінійних операторів у гільбертовому просторі. Далі дається конкретизація цього апарату для опису таких фізичних величин, як координата, імпульс, момент кількості руху та інше. Після цього викладаються методи розв'язання рівняння Шрьодінгера та інші підходи для опису конкретних явищ у мікросвіті.

Деякі формули довідкового характеру (це відноситься головним чином до властивостей спеціальних функцій, які використовуються при виведенні окремих

результатів) винесено у Доповнення.

Задачі

0.1. У досліді Комптона по розсіянню рентгенівських променів на електронах спостерігалось, що розсіяне світло має частоту, меншу за частоту падаючого світла. Це явище називають ефектом Комптона. Пояснити ефект з точки зору корпускулярно-хвильового дуалізму. Показати, що різниця довжин хвиль розсіяного та падаючого світла задовольняє формулі Комптона

$$\Delta\lambda = \lambda_{\text{Ком}}(1 - \cos\theta), \text{ де } \lambda_{\text{Ком}} = \frac{h}{M_e c}$$

довжиною хвилі електрона, M_e - маса електрона, θ - кут розсіяння світла, а c - швидкість світла. Вважати, що початкова швидкість електрона дорівнює нулю.

0.2. При якій швидкості електрона його комптонівська довжина хвилі буде дорівнювати де-бройлевській довжині хвилі?

0.3. Розглянути ефект Комптона, коли світло падає на електрон, який рухається в протилежному напрямку до розповсюдження світла. При яких умовах частота розсіяного світла буде більшою за частоту падаючого світла? Це явище називають *оберненим ефектом Комптона*.

РОЗДІЛ 1. ГОЛОВНІ ПОЛОЖЕННЯ

1.1. Лінійні оператори

При описі квантових явищ зручно використовувати формалізм, що оснований на теорії *лінійних операторів* у гільбертовому просторі. Ми не будемо докладно викладати цю суцільно математичну теорію, а лише сформулюємо означення та положення, які будуть потрібні для подальшого вивчення квантової механіки. Більше того, по необхідності деякі означення, що надано в цьому розділі, будуть уточнюватися та узагальнюються. Жива фізика виявляється значно багатшою, ніж суха система математичних аксіом.

1. *Оператором* називається дія, що переводить кожний елемент g множини G в елемент g' множини G' , $g' = \hat{F}g$. Далі оператори будемо позначати латинськими літерами з “шапочкою”, наприклад \hat{F} .

2. Оператор \hat{F} називають *лінійним*, якщо для довільних елементів g_1 та g_2 множини G виконується рівність

$$\hat{F}(a_1g_1 + a_2g_2) = a_1\hat{F}g_1 + a_2\hat{F}g_2, \quad (1.1)$$

де a_1 та a_2 - довільні комплексні числа.

Прикладами лінійних операторів, що діють у просторі комплексних функцій $f(x)$ дійсної змінної x , можуть бути оператори множення

$$\hat{x}f(x) = xf(x) \quad (1.2)$$

та диференціювання

$$\hat{d}f(x) = \frac{df(x)}{dx}. \quad (1.3)$$

3. Добутком операторів називають таку послідовну дію операторів:

$$\left(\hat{F}_1\hat{F}_2\right)g = \hat{F}_1\left(\hat{F}_2g\right). \quad (1.4)$$

Треба зауважити, що для добутку важливий порядок дії окремих операторів. У цьому легко переконатися розглядаючи добуток операторів множення та диференціювання:

$$\hat{d}\hat{x}f(x) = \frac{d\left[\hat{x}f(x)\right]}{dx} = f(x) + \hat{x}\hat{d}f(x) \neq \hat{x}\hat{d}f(x). \quad (1.5)$$

4. Величину $\left[\hat{F}_1, \hat{F}_2\right] = \hat{F}_1\hat{F}_2 - \hat{F}_2\hat{F}_1$ називають *комутатором* операторів \hat{F}_1 та \hat{F}_2 . Якщо комутатор дорівнює нулеві, то говорять про *комутуючі* оператори, якщо ні – *некомутуючі*. З наведеного вище прикладу випливає, що оператори диференціювання та множення - некомутуючі оператори, $\left[\hat{d}, \hat{x}\right] = 1$.

5. Далі потрібно ввести поняття *одиничного оператора*

$$\hat{I}g = g \quad (1.6)$$

та оператора *оберненого* до \hat{F}

$$\hat{F}^{-1}\hat{F} = \hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{I}. \quad (1.7)$$

Іноді будемо розглядати функцію від оператора $f(\hat{F})$.

Будемо її визначати через відповідний ряд Тейлора:

$$f(\hat{F}) = f(0)\hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0)\hat{F}^n. \quad (1.8)$$

Часто у квантовій механіці за елементи множини, на якій діє оператор, обирають комплексні функції координати частинки $\psi(\vec{x})$. Цю величину називають *хвильовою функцією* частинки. Якщо частинок більше ніж одна, то хвильова функція буде залежати від координат усіх частинок, $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n)$.

6. Скалярним добутком двох хвильових функцій $\varphi(\vec{x})$ та $\psi(\vec{x})$ називається число

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) d^3x, \text{ де } d^3x \equiv dx dy dz. \quad (1.9)$$

Тут і далі зірочка означає комплексне спряження. Якщо частинок декілька, то зміниться лише об'єм інтегрування на $d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_n$. Принципово формули не зміняться.

Очевидно, що для скалярного добутку мають місце наступні властивості

$$\begin{aligned} (a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2, \psi) &= a_1^*(\varphi_1, \psi) + a_2^*(\varphi_2, \psi), \\ (\varphi, a_1\psi_1 + a_2\psi_2) &= a_1(\varphi, \psi_1) + a_2(\varphi, \psi_2), \end{aligned} \quad (1.10)$$

де a_1 та a_2 - довільні комплексні числа.

7. Дві функції називають *ортогональними*, якщо їх скалярний добуток дорівнює нулеві, $(\varphi, \psi) = 0$.

8. Функцію називають *нормованою*, якщо

$$(\psi, \psi) = 1. \quad (1.11)$$

Для того, щоб інтеграл (1.11) був скінченною величиною, допускається, що функції обмежені класом функцій, які досить швидко прямують до нуля, коли $|\vec{x}| \rightarrow \infty$. Це будемо називати *умовою інтегрованості скалярного добутку*. Вважається також, що функції диференційовані стільки разів, скільки це потрібно.

9. Скалярний добуток

$$(\varphi, \hat{F}\psi) = \int \varphi^*(\vec{x}) \hat{F}\psi(\vec{x}) d^3x, \quad (1.12)$$

називається *матричним елементом* оператора \hat{F} між функціями $\psi(\vec{x})$ та $\varphi(\vec{x})$. У випадку, коли ці функції співпадають, матричний елемент $(\psi, \hat{F}\psi)$ називають *середнім значенням* оператора \hat{F} по цій функції.

10. Оператор \hat{F}^\dagger називають *спряженим* до оператора \hat{F} , якщо справджується рівність

$$(\varphi, \hat{F}\psi) = (\psi, \hat{F}^\dagger \varphi)^* \quad (1.13)$$

Зазначимо, що:

$$10.1. \text{ спряжений оператор від добутку операторів є } (\hat{F}_1 \hat{F}_2 \dots \hat{F}_n)^\dagger = \hat{F}_n^\dagger \hat{F}_{(n-1)}^\dagger \dots \hat{F}_1^\dagger;$$

$$10.2. (\hat{A}\psi_1, \hat{B}\psi_2) = \int d^3x \psi_1^*(\vec{x}) \hat{A}^\dagger \hat{B} \psi_2(\vec{x}).$$

11. Важливу роль у квантовій механіці відіграють такі оператори, для яких спряжений оператор співпадає із самим оператором

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F} \quad (1.14)$$

Такі оператори називають *самоспряженими* або *ермітовими*. Надалі будемо вживати другий термін.

Зауважимо, що оператор диференціювання не є ермітовим. Покажемо це на прикладі одномірної хвильової функції:

$$\begin{aligned} (\varphi, \hat{d}\psi) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} [\varphi^*(x) \psi(x)] dx - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varphi^*(x)}{dx} \psi(x) dx = \\ &= \varphi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varphi^*(x)}{dx} \psi(x) dx. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Згідно з умовою інтегрованості перший інтеграл дорівнює нулю. Тому:

$$\begin{aligned} (\varphi, \hat{d}\psi) &= - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d\varphi^*(x)}{dx} \right] \psi(x) dx = \\ &= - \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} dx \right]^* = -(\psi, \hat{d}\varphi)^*. \end{aligned} \quad (1.16)$$

12. Оператор, для якого виконується умова, що $(\varphi, \hat{F}\psi) = -(\psi, \hat{F}\varphi)^*$, називається *антиермітовим*. Заміною $\hat{F} \rightarrow \pm i\hat{F}$ антиермітовий оператор перетворюється на ермітовий.

13. Якщо для оператора \hat{F} знайдено таку функцію $\psi(\vec{x})$, що виконується співвідношення

$$\hat{F}\psi(\vec{x}) = f\psi(\vec{x}), \quad (1.17)$$

де f - комплексне число, то функцію $\psi(\vec{x})$ називають *власною функцією* оператора, а число f - *власним числом*. Якщо одному й тому самому числу f відповідають декілька лінійно-незалежних власних функцій, то говорять про *вироджений стан*, а максимальне число лінійно-незалежних власних функцій, які відповідають одному власному значенню, називають *кратністю виродження*. набір власних значень називають *спектром* оператора.

Очевидно, що середнє значення від оператора по його власній функції, яка нормована, дорівнює його власному значенню, $(\psi, \hat{F}\psi) = f$.

Легко довести, що власні значення ермітового оператора дійсні числа:

$$f = (\psi, \hat{F}\psi) = (\psi, \hat{F}^\dagger\psi)^* = (\psi, \hat{F}\psi)^* = f^*. \quad (1.18)$$

Надалі нас будуть цікавити лише власні значення ермітових операторів, бо їх будемо ототожнювати з вимірюваними значеннями фізичних величин.

Оператори, що діють на функціях, які задовольняють умові інтегрованості, мають *дискретний спектр*, тобто їх власні значення можна перенумерувати набором цілих чисел n . Тому надалі до власних значень та власних функцій будемо додавати індекс, f_n , $\psi_n(\vec{x})$. Власні функції ермітових операторів, які відповідають різним власним значенням, взаємно ортогональні. Використовуючи умову нормування (1.11) маємо умову ортонормованості

$$(\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm}. \quad (1.19)$$

14. Якщо спряжений оператор дорівнює своєму оберненому оператору, то такий оператор називають унітарним,

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F}^{-1} \quad \text{або} \quad \hat{F}^\dagger \hat{F} = \hat{F} \hat{F}^\dagger = \hat{I}. \quad (1.20)$$

Існують три важливі теореми, на які далі будемо посилалися і які тут формулюємо без доведення:

1. Власні функції ермітових операторів створюють повний набір $\psi_n(\vec{x})$, тобто будь-яку функцію $\phi(\vec{x})$ інтегровану із квадратом свого модуля, можна розкласти по цим функціям

$$\phi(\vec{x}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{x}), \quad (1.21)$$

де c_n – комплексні числа. Цю теорему називають *умовою повноти*.

2. Ермітові оператори, які комутують, мають спільний повний набір власних функцій.

3. Якщо ермітові оператори мають спільний повний набір власних функцій, то вони комутують (теорема, обернена до попередньої).

1.2. Зв'язок операторів з фізичними величинами.

Квантові дужки Пуассона

У квантовій механіці фізичні величини описуються за допомогою ермітових операторів, а їх значення, що вимірюються на досліді, відповідають власним значенням цих операторів. Як вже говорилося, умова ермітовості накладається на оператори для того, щоб виміряні фізичні величини були дійсними. Зауважимо, що на відміну від класичної фізики, не всі фізичні величини можуть бути виміряні одночасно (принцип невизначеності Гайзенберга). Відповідно до властивостей операторів це означає, що величини, які можна виміряти одночасно, повинні описуватись комутуючими операторами.



Рис. 2. Вернер Гайзенберг, один із творців квантової механіки. Йому належить створення матричної форми квантової механіки, формулювання принципу невизначеності та інші важливі результати.

Таким чином, у певному квантовому стані частинка характеризується набором ν значень фізичних величин, які можуть бути виміряні одночасно (*спостережувані*). Цей набір називають *квантовими числами* стану. Сам стан, у якому знаходиться частинка, описують хвильовою функцією $\psi_\nu(\vec{x})$, яка є власною функцією відповідних операторів.

Хвильова функція не має безпосередньої фізичної інтерпретації. Проте квадрат її модуля $|\psi_\nu(\vec{x})|^2$ має зміст густини ймовірності знайти частинку, що перебуває у квантовому стані ν , у точці \vec{x} .

Якщо система може бути у двох квантових станах, $\psi_1(\vec{x})$ та $\psi_2(\vec{x})$, то лінійна комбінація цих станів теж буде допустимою хвильовою функцією системи:

$$\psi(\vec{x}) = c_1\psi_1(\vec{x}) + c_2\psi_2(\vec{x}). \quad (1.22)$$

В цьому полягає важливий принцип квантової механіки, *принцип суперпозиції*. Для того, щоб хвильова функція (1.22) була нормованою, на коефіцієнти c_1 та c_2 потрібно накласти умову

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (1.23)$$

Якщо стани 1 та 2 відповідають різним значенням енергії, то їх суперпозиція (1.22) відповідає такому квантовому стану, коли частинка не має певного значення енергії. Дійсно, енергія визначається як власне значення оператора Гамільтона \hat{H} (сума операторів кінетичної та потенціальної енергій, $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$)

$$\hat{H}\psi_n(\vec{x}) = E_n\psi_n(\vec{x}). \quad (1.24)$$

Тому якщо хвильова функція визначається згідно (1.22), то одержимо:

$$\hat{H}\psi(\vec{x}) = c_1E_1\psi_1(\vec{x}) + c_2E_2\psi_2(\vec{x}) \neq E\psi(\vec{x}). \quad (1.25)$$

Проте для стану (1.22) можна говорити про середнє значення енергії:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \psi^*(\vec{x}) \hat{H} \psi(\vec{x}) d^3x = \quad (1.26)$$

$$\begin{aligned}
 &= |c_1|^2 E_1 \int |\psi_1(\vec{x})|^2 d^3x + |c_2|^2 E_2 \int |\psi_2(\vec{x})|^2 d^3x = \\
 &= |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2.
 \end{aligned}$$

Принцип відповідності та дужки Пуассона.

Вважається, що взаємозв'язок між операторами такий самий, як і між фізичними величинами у класичній фізиці. Наприклад,

- оператор кінетичної енергії визначається як $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$,
- оператор моменту кількості руху як $\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$,

де \hat{p} та \hat{x} - оператори імпульсу та координати, а m - маса частинки.

Написані вище співвідношення не дають остаточної відповіді, як визначити відповідні оператори, бо оператори координати та імпульсу залишаються невизначеними. Для того, щоб їх визначити, розглянемо наступні міркування.

У класичній механіці координата та імпульс є так званими канонічно-спряженими величинами, тобто дужки Пуассона для них дорівнюють

$$\{x_i, x_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{p_i, x_j\} = \delta_{ij}. \quad (1.27)$$

Нагадаємо, що дужка Пуассона між двома фізичними величинами $F_1(\vec{x}, \vec{p})$ та $F_2(\vec{x}, \vec{p})$, які є функціями координат та імпульсів, визначається відповідно

$$\{F_1, F_2\} = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial F_1}{\partial p_i} \frac{\partial F_2}{\partial x_i} - \frac{\partial F_1}{\partial x_i} \frac{\partial F_2}{\partial p_i} \right). \quad (1.28)$$

Через дужки Пуассона рівняння руху Гамільтона записуються як

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{H, F\}, \quad (1.29)$$

де H - класична функція Гамільтона.

Дужка Пуассона має важливі властивості

$$\{F_1, F_2\} = -\{F_2, F_1\}, \quad (1.30)$$

$$\begin{aligned} \{F, c\} &= 0, \text{ де } c - \text{ стала,} \\ \{F_1 + F_2, F_3\} &= \{F_1, F_3\} + \{F_2, F_3\}, \\ \{F_1 F_2, F_3\} &= F_1 \{F_2, F_3\} + \{F_1, F_3\} F_2, \\ \{F_1, \{F_2, F_3\}\} + \{F_2, \{F_3, F_1\}\} + \{F_3, \{F_1, F_2\}\} &= 0. \end{aligned}$$

Останнє співвідношення називають тотожністю Якобі.

П. Дірак запропонував ввести поняття квантової дужки Пуассона. Звичайно, квантова дужка Пуассона має задовольняти усім властивостям (1.30). Незавжди побачити, що цій умові задовольняє комутатор між операторами, помножений на довільну константу

$$\{\hat{F}_1, \hat{F}_2\} = c [\hat{F}_1, \hat{F}_2]. \quad (1.31)$$

Використовуючи 10.1 легко показати, що комутатор від ермітових операторів є антиермітів оператор. Тому для того, щоб квантова дужка Пуассона від ермітових операторів була ермітовим оператором, число c має бути уявним, $c = ic'$. Число c' має розмірність оберненої дії. Виявляється, що слід покласти

$$c' = \frac{1}{\hbar}. \quad (1.32)$$

В результаті одержуємо кінцевий вираз для квантової дужки Пуассона:

$$\{\hat{F}_1, \hat{F}_2\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{F}_1, \hat{F}_2]. \quad (1.33)$$

Природньо припустити, що всі вирази, записані через дужку Пуассона, як у класичній механіці, так і у квантовій, однакові. Тоді враховуючи вирази (1.27), одержимо наступні комутатори

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}. \quad (1.34)$$

Якщо вважати, що оператор координати є оператором множення на координату,

$$\hat{x}_i \psi(\vec{x}) = x_i \psi(\vec{x}), \quad (1.35)$$

то оператором, який задовольняє комутаційним співвідношенням (1.34), є наступний оператор диференціювання

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla. \quad (1.36)$$

Знайдемо власні функції та власні значення оператора імпульсу. За означенням вони визначаються як такі функції, що задовольняють рівнянню

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \vec{p} \psi_{\vec{p}}(\vec{x}). \quad (1.37)$$

Легко бачити, що розв'язком цього рівняння є *плоскі хвилі*

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = C \exp\left(\frac{i\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}\right), \quad (1.38)$$

де \vec{p} - довільний вектор. Оператор імпульсу (1.36) є прикладом оператора, який має *неперервний спектр*. При цьому його власна функція (1.38) очевидно не задовольняє умові інтегрування і таким чином константу нормування C не можна визначити з рівняння (1.11). Це пов'язано з тим, що ця хвильова функція відповідає частинці, яка виконує *інфінітний рух* і тому ймовірність її знаходження у нескінченно віддаленій точці не дорівнює нулю. В цьому випадку потрібно відмовитись від умови 1 і проводити нормування хвильової функції виходячи з умови

$$\int \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{x}) \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) d^3x = \delta(\vec{p}' - \vec{p}), \quad (1.39)$$

де

$$\delta(\vec{p}' - \vec{p}) = \delta(p'_x - p_x) \delta(p'_y - p_y) \delta(p'_z - p_z) \quad (1.40)$$

добуток трьох δ -функцій Дірака. Легко бачити, що ця умова є узагальненням умови (1.19) на випадок неперервного спектру. Користуючись інтегральним представленням для δ -функції

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixt} dt \quad (1.41)$$

одержимо константу нормування і остаточно плоска хвиля є

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{i\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}\right). \quad (1.42)$$



Рис. 3. Ервін Шрґодінґер, написав одне з важливих рґвнянь квантової механіки, яке носить його ім'я.

1.3.Рґвняння Шрґодінґера

Тепер слґд розглянути, як описується розвиток квантової системи у часі. Значимо, що це можна зробити рґзними шляхами. Зараз ми розглянемо один із них. Будемо вважати, що для того, щоб визначити хвильову функцію у момент часу $t > 0$, досить задати її значення в момент часу $t = 0$. Математично це означає, що відповідне диференційне рґвняння має бути рґвнянням першого степеня по часовій похідній,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \hat{F} \Psi(\vec{x}, t), \quad (1.43)$$

де \hat{F} - деякий оператор, який не містить диференціювання по часу, а множник у лівій частині введено для зручності. Єдиний принцип, який дозволяє обґрунтувати вибір оператора \hat{F} , це необхідність, щоб рґвняння (1.43) переходило в одне з класичних рґвнянь руху у випадку, коли стала Планка прямує до нуля. Виявляється, що цій умові можна задовольнити, якщо ототожнити оператор \hat{F} з оператором Гамільтона \hat{H} і рґвняння (1.43) прийме вигляд

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(\vec{x}) \right] \Psi(\vec{x}, t) \quad (1.44)$$

Підставляючи сюди вираз для оператора імпульсу (1.36) одержимо рґвняння Шрґодінґера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}(\vec{x}) \right] \Psi(\vec{x}, t), \quad (1.45)$$

де

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \quad (1.46)$$

оператор Лапласа. Безпосередньо з рівняння (1.45) не очевидно, що при $\hbar \rightarrow 0$ воно зводиться до рівняння класичної механіки. Це питання буде розглянуто в наступному Розділі.

Зазначимо, що вважається, що оператори координати та імпульсу не залежать від часу. Залежність від часу міститься у хвильовій функції. Цю залежність можна описати з допомогою оператора еволюції $\hat{S}(t)$, який визначається згідно

$$\Psi(\vec{x}, t) = \hat{S}(t)\Psi(\vec{x}, 0) = \hat{S}(t)\psi(\vec{x}). \quad (1.47)$$

Підставляючи (1.47) в рівняння Шрödінгера одержимо рівняння

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t)}{\partial t} = \hat{H}\hat{S}(t), \quad (1.48)$$

яке разом з умовою

$$\hat{S}(0) = 1 \quad (1.49)$$

однозначно визначає оператор еволюції

$$\hat{S}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right). \quad (1.50)$$

Цей оператор унітарний, що приводить до збереження ймовірності з часом. Щоб це показати, можна, згідно з теоремою 1, хвильову функцію $\Psi(\vec{x}, 0)$ розкласти по власних функціях оператора Гамільтона

$$\Psi(\vec{x}, 0) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{x}), \quad \sum_n |c_n|^2 = 1, \quad (1.51)$$

де

$$\hat{H}\psi_n(\vec{x}) = E_n\psi_n(\vec{x}). \quad (1.52)$$

Рівняння (1.52) називають *стаціонарним рівнянням Шрödінгера*.

Після дії оператора еволюції на функцію (1.51) одержимо

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \psi_n(\vec{x}). \quad (1.53)$$

В загальному випадку хвильова функція (1.51) не є власною функцією гамільтоніана, тобто квантовий стан, який відповідає цій хвильовій функції не має певного значення енергії. Проте, як вже відзначалося вище, для нього можна говорити про певне значення середньої енергії

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \Psi^*(\vec{x}, 0) \hat{H} \Psi(\vec{x}, 0) d^3x = \sum_n c_n^2 E_n. \quad (1.54)$$

Звичайно, густина ймовірності, $|\Psi(\vec{x}, t)|^2$, залежить від часу, проте умова нормування, очевидно, від часу не залежить

$$\int d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = \int d^3x |\Psi(\vec{x}, 0)|^2 = \sum_n |c_n|^2. \quad (1.55)$$

У випадку неперервного спектру замість суми по дискретним станам у формулах (1.51)-(1.55) потрібно написати інтегрування по неперервному спектру станів.

Тепер одержимо квантові рівняння руху. З цією метою розглянемо похідну по часу від середнього значення довільного оператора по хвильовій функції (1.47):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle &= \frac{d}{dt} \int d^3x \Psi^*(\vec{x}, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{F} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \Psi(\vec{x}, 0) = \\ &= \int d^3x \Psi^*(\vec{x}, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{F} + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} \hat{F} \hat{H} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \Psi(\vec{x}, 0) = \\ &= \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Таким чином природно визначити повну похідну від оператора по часу як

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]. \quad (1.57)$$

Це співвідношення є квантовим аналогом класичного рівняння (1.29).

Покажемо, що з рівняння Шрьодінгера випливає рівняння неперервності. З цією метою помножимо рівняння (1.45) на $\Psi^*(\vec{x}, t)$ зліва. Далі візьмемо рівняння, комплексно спряжене до

(1.45) і помножимо його з правої сторони на $\Psi(\vec{x}, t)$. Після цього віднімемо від першого рівняння друге і одержимо:

$$\begin{aligned} i\hbar \left[\Psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*(\vec{x}, t)}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) \right] = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Psi^*(\vec{x}, t) \Delta \Psi(\vec{x}, t) - \Delta \Psi^*(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t) \right]. \end{aligned}$$

Звідси після очевидних перетворень одержимо рівняння неперервності:

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}(\vec{x}, t) = 0, \quad (1.58)$$

де вектор

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[\Psi^*(\vec{x}, t) \nabla \Psi(\vec{x}, t) - \nabla \Psi^*(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t) \right] \quad (1.59)$$

має зміст вектора *густини струму ймовірності*, тобто представляє собою середній потік частинок через одиницю площі в одиницю часу.

Задачі

1.1. Показати, що оператор інверсії $\hat{P}\psi(\vec{x}) = \psi(-\vec{x})$ ермітов. Знайти власні функції та власні значення оператора інверсії (їх називають *парністю* відповідних станів).

1.2. Знайти явний вигляд оператора $\exp(i\pi\hat{P})$, де \hat{P} - оператор інверсії.

1.3. Показати, що оператор $\hat{T}_a = \exp\left(a \frac{d}{dx}\right)$, де a - константа, є оператором зсуву, тобто $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$.

1.4. Довести тотожність

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

1.5. Виходячи з комутаційних співвідношень між операторами імпульсу та координати знайти комутаційні

співвідношення між компонентами оператора моменту кількості руху $\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$. Чи комутує оператор квадрата моменту кількості руху \hat{L}^2 з його проекціями \hat{L}_x , \hat{L}_y та \hat{L}_z ? Який фізичний зміст отриманих комутаційних співвідношень?

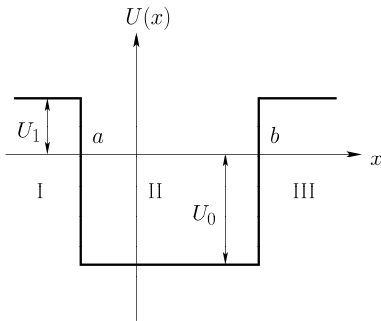


Рис. 4. Прямокутна потенційна яма.

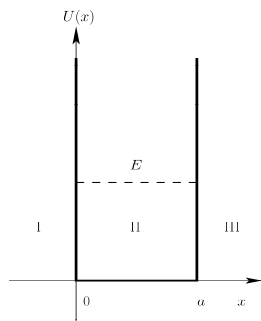


Рис. 5. Прямокутна потенційна яма безмежної глибини.

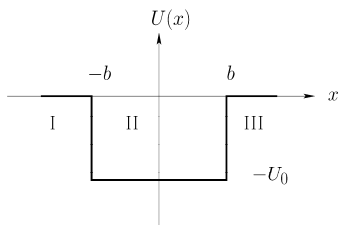


Рис. 6. Потенціальна яма для Задачі 1.9.

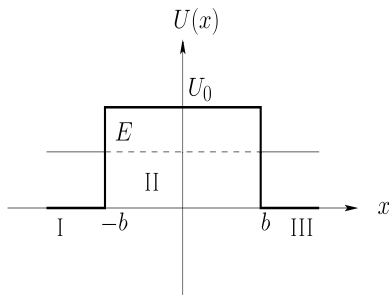


Рис. 7. Квантова частинка пролітає крізь потенційний бар'єр, що неможливо у класичній фізиці.

1.6. Знайти оператори швидкості та прискорення частинки, що знаходиться у потенціалі $U(\vec{x})$.

1.7. Знайти вектор густини струму ймовірності для плоскої хвилі (1.42).

1.8. Квантова частинка яка рухається у одномірному просторі знаходиться у прямокутній потенціальній ямі скінченної глибини (Рис. 4).

- (i) Знайти розв'язки рівняння Шрьодінгера в усіх трьох областях (I, II, III). Розглянути два випадки, коли енергія частинки $E > U_1$ та $E < U_1$. Які умови потрібно накласти на знайдені хвильові функції в окремих областях, щоб рівняння неперервності мало зміст в усій області значень координати x ?
- (ii) Знайти рівняння, які визначають рівні енергії дискретного спектру ($E < U_1$).

1.9. Частинка знаходиться у прямокутній потенціальній енергії безмежної глибини (Рис. 5). Знайти енергетичний спектр та відповідні нормовані хвильові функції.

1.10. Потік частинок падає зліва на потенціальну яму зображену на Рис. 6. В результаті деяка доля частинок пролітає крізь яму і попадає у область III, а решта відбивається і залишається у області I.

- (i) Знайти коефіцієнти проходження D та відбивання R (тобто долю частинок, які пройшли у область III і які залишились у області I).
- (ii) При якій умові коефіцієнт проходження дорівнює 1? Це явище називають *резонансом*.

1.11. Розрахувати коефіцієнт проходження для випадку потенціальної ями зображеної на Рис. 7 при умові $E < U_0$ (*тунельний ефект*).

1.12. Знайти коефіцієнт нормування N для хвильової функції

$$\psi(x) = N \exp\left(ikx - \frac{1}{2a^2}x^2\right).$$

Розрахувати середньоквадратичний розмір квантової системи, яка описується цією хвильовою функцією.

1.13. Розв'язати рівняння Шрьодінгера для потенціалу гармонічного осцилятора, $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \kappa x^2\right) \psi(x) = E \psi(x)$.

РОЗДІЛ 2. КВАЗІКЛАСИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ

2.1. Квazікласичний розклад рівняння Шрьодінгера



Рис. 8. Г.Вентцель (ліворуч), Х.Крамєрс (посередині) та Л.Бріллюєн (праворуч) розробили метод квазікласичного наближення у квантовій механіці.

Тепер займемося питанням відповідності між квантовою і класичною механікою. Перехід до класичної границі можна розглядати як граничний перехід $\hbar \rightarrow 0$. Проте для того, щоб це зробити в рівнянні Шрьодінгера необхідно правильно врахувати залежність хвильової функції $\Psi(\vec{x}, t)$ від \hbar . Інакше ми отримаємо абсурдну відповідь.

З цієї метою слід переписати хвильову функцію у вигляді

$$\Psi(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}, t)\right), \quad (2.1)$$

де поки що невідома функція $S(\vec{x}, t)$ має розмірність дії. Трохи нижче побачимо, що $S(\vec{x}, t)$ не пропадає у класичному наближенні, а переходить у класичну дію. Відповідно до (2.1) це означає, що для хвильової функції характерні швидкі осциляції при наближенні \hbar до 0 і поняття хвильової функції втрачає сенс при граничному переході. Що ж при цьому відбувається з рівнянням Шрьодінгера?

Для того, щоб дати відповідь на останнє питання підставимо (2.1) в рівняння Шрьодінгера (1.46)

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U - \frac{i\hbar}{2m} \Delta S. \quad (2.2)$$

Очевидно, що це рівняння вже допускає перехід до класичної границі шляхом спрямування в його правій частині сталої Планка до нуля. Отже, далі функцію $S(t, \vec{x})$ можна розкласти в ряд по степенях \hbar

$$S(\vec{x}, t) = S_0(\vec{x}, t) + \frac{\hbar}{i} S_1(\vec{x}, t) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2(\vec{x}, t) + \dots \quad (2.3)$$

(тут додатковий множник $1/i$ введений для зручності). Потім слід підставити (2.3) в (2.2) і в лівій і в правій частинах отриманого рівняння прирівняти множники при однакових степенях \hbar . В нульовому та першому порядках такого розкладу одержимо

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\nabla S_0)^2 + U, \quad (2.4)$$

$$-\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{1}{m} \nabla S_0 \nabla S_1 + \frac{\Delta S_0}{2m}. \quad (2.5)$$

Такий розклад називають *квазікласичним*. Зазначимо, що перше з цих рівнянь як раз і є рівняння, в яке переходить рівняння Шрьодінгера у випадку $\hbar \rightarrow 0$.

Квазікласичний розклад дозволяє сформулювати регулярний метод розв'язання рівняння Шрьодінгера, який називають *методом квазікласичного розкладу* чи *методом Венцеля, Крамерса і Бріллюена* (скорочено – *метод ВКБ*).

2.2. Хвильова функція в квазікласичному наближенні

Якщо $S_0(\vec{x}, t)$ розглядати як класичну дію, то рівняння (2.4) представляє ні що інше, як класичне рівняння Гамільтона-Якобі. Тепер обговоримо фізичний зміст рівняння (2.5).

З цією метою помножимо праву і ліву частини рівняння (2.5) на густину ймовірності знаходження частинки в даному місці

простору в момент часу t . Густина ймовірності одержимо як квадрат модуля хвильової функції (2.1), підставивши в неї розклад (2.3) і опустивши члени порядку \hbar^2 :

$$\rho(\vec{x}, t) = \exp\left[2S_1(\vec{x}, t)\right]. \quad (2.6)$$

Далі використаємо класичні вирази для імпульсу частинки та її швидкості:

$$\vec{p} = \nabla S_0(\vec{x}, t), \quad \vec{v} = \frac{1}{m} \nabla S_0(\vec{x}, t). \quad (2.7)$$

Після деяких перетворень отримаємо, що рівняння (2.5) зводиться до рівняння неперервності

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} = \operatorname{div}(\vec{v}\rho). \quad (2.8)$$

Таким чином виявляється, що густина ймовірності переміщується по її класичній траєкторії із швидкістю класичної частинки.

Для того, щоб спростити подальші роздуми, обмежимося розглядом випадку стаціонарного стану з енергією E . Тоді хвильова функція може бути представлена у вигляді

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \quad (2.9)$$

і для функції $S(t, \vec{x})$ маємо

$$S(\vec{x}, t) = \tilde{S}(\vec{x}) - Et. \quad (2.10)$$

При цьому ВКБ-розклад не буде містити часу в явному вигляді

$$\tilde{S}(\vec{x}) = \tilde{S}_0(\vec{x}) + \frac{\hbar}{i} \tilde{S}_1(\vec{x}) + \dots, \quad (2.11)$$

а рівняння (2.4) і (2.5) перейдуть в

$$E = \frac{1}{2m} (\nabla \tilde{S}_0)^2 + U, \quad (2.12)$$

$$0 = \nabla \tilde{S}_0 \nabla \tilde{S}_1 + \frac{1}{2} \Delta \tilde{S}_0. \quad (2.13)$$

З першого рівняння можна знайти функцію \tilde{S}_0 , потім її підставити у друге рівняння і визначити \tilde{S}_1 . Далі, в принципі, цю процедуру можна продовжити для більш високих членів ВКБ-розкладу.

Розглянемо більш докладно процедуру розв'язання рівнянь (2.12) і (2.13) на прикладі одновимірного руху. В цьому випадку (2.12) зводиться до

$$E = \frac{1}{2m} \left(\frac{d\tilde{S}_0}{dx} \right)^2 + U = \frac{p^2}{2m} + U, \quad (2.14)$$

звідки отримуємо класичний вираз для імпульсу частинки

$$\frac{d\tilde{S}_0}{dx} = p(x) = \pm q(x), \quad \text{де} \quad q(x) = \sqrt{2m(E-U)}. \quad (2.15)$$

Відповідно,

$$\tilde{S}_0 = \pm \int_{x_0}^x q(y) dy. \quad (2.16)$$

Підставляючи (2.15) в (2.13), отримаємо рівняння

$$\frac{d\tilde{S}_1}{dx} = -\frac{1}{2q} \frac{dq}{dx}, \quad (2.17)$$

з якого одержимо:

$$\tilde{S}_1 = -\frac{1}{2} \int \frac{dq}{q} = -\frac{1}{2} \ln q + \ln C. \quad (2.18)$$

Таким чином, знаходимо хвильову функцію з точністю до членів порядку \hbar^2 :

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{q(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy \right] + \frac{C_2}{\sqrt{q(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy \right]. \quad (2.19)$$

Важливо те, що в класичному випадку імпульс частинки завжди дійсний. Це, згідно (2.15), означає, що *класично дозволеною областю* є область, в якій $E > U(x)$. При цьому хвильову функцію (2.19) завжди можна записати у вигляді осцилюючої функції

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{q}} \sin \left(\int_{x_0}^x q(y) dy + \varphi_0 \right), \quad (2.20)$$

де множник $\frac{1}{\sqrt{q}}$ означає, що ймовірність виявити частинку в малому об'ємі біля точки x обернено пропорційна швидкості частинки U .

Істотно новим, в порівнянні з класичною механікою, є те, що (2.19) допускає існування хвильової функції, а отже і ненульової ймовірності, існування частинки поза класично дозволеною областю $E < U(x)$. При цьому імпульс стає чисто уявним, а хвильова функція має вигляд експоненціально спадаючої функції. Особливе значення мають точки, в яких $U(x) = E$. Їх називають *точками повороту*, оскільки в них класична частинка зупиняється і починає рух в зворотному напрямі. В цих точках $q = 0$ і отриманий вираз (2.19) для хвильової функції стає нескінченним. Це пояснюється тим, що в малому околі точки повороту ВКБ-розклад стає неприйнятним. Щоб в цьому переконатися розглянемо границю допустимості квазікласичного наближення.

2.3. Умова допустимості квазікласичного наближення

Із рівняння (2.2) бачимо, що S переходить в класичну дію, якщо вважати, що

$$(\nabla \tilde{S}_0)^2 \square \hbar |\Delta \tilde{S}_0|. \quad (2.21)$$

Звідси отримаємо

$$|\vec{p}|^2 \square \hbar \operatorname{div} \vec{p}. \quad (2.22)$$

Для одновимірного руху ця умова зводиться до

$$1 \square \frac{\hbar \left| \frac{dp}{dx} \right|}{p^2} = \frac{\left| \frac{dk}{dx} \right|}{k^2} = \frac{d\tilde{\lambda}}{dx}, \quad (2.23)$$

де $\tilde{\lambda} = \frac{\hbar}{p}$ – довжина хвилі де-Бройля поділена на 2π .

Якщо a – характерний розмір системи, то можна вважати

$$\frac{d\tilde{\lambda}}{dx} \approx \frac{\tilde{\lambda}}{a}$$

і довжина хвилі повинна бути набагато менша за характерні розміри системи. Це, в свою чергу, означає, що імпульс частинки повинен бути достатньо великим. Щоб надати останньому твердженню кількісну оцінку, розглянемо одновірний рух і перепишемо (2.22) вводячи в правій частині явний вираз для імпульсу через енергію і

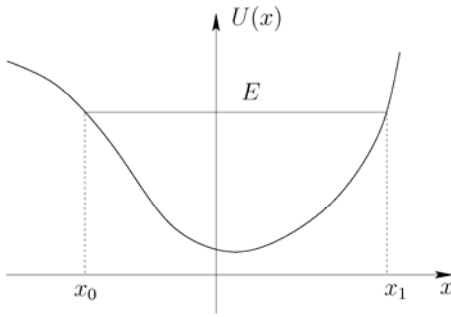


Рис. 9. Рух частинки фінітний. Класично допустима зона знаходиться між точками повороту x_0 і x_1 .

потенціал:

$$|p|^3 \approx \hbar m \left| \frac{dU}{dx} \right|. \quad (2.24)$$

Звідси випливає, що в точках повороту, де $p \rightarrow 0$, квазікласичний розклад неприйнятний.

Розглянемо також інший запис цієї умови, яка нам згодиться далі. Підставляючи в (2.24) явний вираз (2.15) для імпульсу і розкладаючи потенціал в ряд біля точки повороту x_0

$$U(x) \approx E - \Delta x F, \quad \text{де } F = - \left. \frac{dU}{dx} \right|_{x=x_0} \quad \text{та } \Delta x = x - x_0 \quad (2.25)$$

отримаємо

$$r \equiv |\Delta x| \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m|F|} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (2.26)$$

2.4. “Зшивання” хвильової функції в точках повороту. Випадок фінітного руху

Практичну цінність метод ВКБ буде мати лише тоді, якщо вдасться плавно зв'язати осцилюючі та експоненціальні розв'язки в точках повороту.

Одним із способів вирішення цієї проблеми є явне розв'язання рівняння Шрьодінгера поблизу точок повороту і подальше “зшивання” квазікласичних хвильових функцій через отримані розв'язки.

Розглянемо випадок, коли рух частинки фінітний (Рис. 9). В цьому випадку квазікласичним розв'язком є (нагадаємо, що для фінітного руху вимагається, щоб хвильова функція прямувала до нуля при $x \rightarrow \pm\infty$)

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C_0}{\sqrt[4]{2m[U(x)-E]}} \exp\left\{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy\right\}, & \text{при } x < x_0, \\ \frac{A}{\sqrt{q(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy + \varphi_0\right\}, & \text{при } x_0 < x < x_1, \\ \frac{C_1}{\sqrt[4]{2m[U(x)-E]}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy\right\}, & \text{при } x > x_1. \end{cases} \quad (2.27)$$

Відмітимо, що розв'язки всередині класично дозволеної зони можна записати іншим чином

$$\psi(x) = \frac{A'}{\sqrt{q(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} q(y) dy + \varphi_1\right\}, \quad \text{при } x_0 < x < x_1. \quad (2.28)$$

Перетворимо (2.28) так, щоб виразити його через відповідний вираз формули (2.27)

$$\begin{aligned} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} q(y) dy + \varphi_1\right\} &= \\ &= -\sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \dots - \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \dots - \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} \dots - \varphi_1 + \varphi_0 - \varphi_0\right\} = \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$= -\sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \dots + \varphi_0 - \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \dots - \varphi_0 - \varphi_1 \right\} = -\sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \dots + \varphi_0 + \varphi \right\},$$

де введено позначення $\varphi = -\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} q(y) dy - \varphi_0 - \varphi_1$. Для того, щоб

цей розв'язок був тотожний розв'язку (2.27), необхідно вимагати, щоб $\varphi = -n'\pi$, де n' - ціле число, або

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} q(y) dy = n'\pi - \varphi_0 - \varphi_1 \text{ і } A = (-1)^{n'+1} A'. \quad (2.30)$$

Вводячи інтеграл по періоду класичного руху, перепишемо (2.30) у вигляді

$$\frac{1}{2\hbar} \oint p(y) dy = n'\pi - \varphi_0 - \varphi_1. \quad (2.31)$$

Займемося тепер зшиванням розв'язків у області точки повороту x_0 . Для цього проведемо розклад (2.27) для потенціалу біля цієї точки

$$U \approx E - (x - x_0)F. \quad (2.32)$$

В результаті рівняння Шрьодінгера перетворюється на

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho \right) \varphi(\rho) = 0, \quad (2.33)$$

де введено такі позначення

$$\rho = \left(\frac{2Fm}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} (x_0 - x) \text{ і } \varphi(\rho) = \psi(x). \quad (2.34)$$

Використовуючи умову (2.26) отримаємо, що у області, де справедливе квазікласичне наближення, $|\rho| \gg 1$. Таким чином, щоб зв'язати розв'язки рівняння (2.33) з розв'язками, які одержано у квазікласичному наближенні, необхідно знайти асимптотичні розв'язки рівняння (2.33). Розв'язки рівняння (2.33) відомі і називаються функціями Ейрі (див. Додаток А)

$$\varphi(\rho) = C \text{ Ai}(\rho) \text{ і } \varphi(\rho) = C \text{ Bi}(\rho). \quad (2.35)$$

При $\rho \rightarrow \pm\infty$ асимптотична поведінка функції Ейрі така

$$\text{Ai}(\rho) \approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{2\sqrt[4]{\rho}} \exp\left\{-\frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}}\right\}, & \text{при } \rho \rightarrow +\infty, \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{-\rho}} \sin\left\{\frac{2}{3}|\rho|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right\}, & \text{при } \rho \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad (2.36)$$

$$\text{Bi}(\rho) \approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{\rho}} \exp\left\{\frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}}\right\}, & \text{при } \rho \rightarrow +\infty, \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{-\rho}} \cos\left\{\frac{2}{3}|\rho|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right\}, & \text{при } \rho \rightarrow -\infty. \end{cases}$$

В свою чергу, біля точки x_0 квазікласичні хвильові функції, записані через змінну ρ , мають наступний вигляд:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C_0}{\sqrt[4]{\rho}} \left[\frac{1}{2\hbar m F} \right]^{\frac{1}{6}} \exp\left\{-\frac{2}{3}\rho^{\frac{3}{2}}\right\}, & \text{при } x < x_0, \\ \frac{A}{\sqrt[4]{-\rho}} \left[\frac{1}{2\hbar m F} \right]^{\frac{1}{6}} \sin\left\{\frac{2}{3}|\rho|^{\frac{3}{2}} + \varphi_0\right\}, & \text{при } x > x_0. \end{cases} \quad (2.37)$$

Очевидно, щоб плавно зшити ці рівняння з (2.36), необхідно це зробити через функцію Ейрі першого роду $\text{Ai}(\rho)$ (яка спадає при $\rho \rightarrow +\infty$), поклавши при цьому

$$C_0 = \frac{1}{2}A \quad \text{і} \quad \varphi_0 = \frac{\pi}{4}. \quad (2.38)$$

Тепер розкладемо потенціал біля точки повороту x_1

$$U \approx E + (x - x_1)F. \quad (2.39)$$

Вводячи змінну $\rho_1 = \left(\frac{2Fm}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(x - x_1)$ приведемо рівняння

Шрьодінгера до вигляду

$$\left(\frac{d^2}{d\rho_1^2} - \rho_1 \right) \varphi(\rho_1) = 0. \quad (2.40)$$

Тепер для класично допустимої області використаємо хвильову функцію (2.28) і повторимо всі роздуми, які були викладені вище. В результаті отримуємо

$$C_1 = \frac{1}{2} A', \quad \varphi_1 = \frac{\pi}{4}, \quad (2.41)$$

а умова (2.31) прийме вигляд

$$\frac{1}{2\hbar} \left[\int \right] p(y) dy = \left(n' - \frac{1}{2} \right) \pi = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (2.42)$$

де $n = n' + 1$. З врахуванням співвідношення між константами A і A' (2.30) хвильова функція приймає вигляд

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{2\sqrt{2m[U(x)-E]}} \exp\left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy \right\}, & \text{при } x < x_0, \\ \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} \sin\left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(y)| dy + \frac{\pi}{4} \right\}, & \text{при } x_0 < x < x_1, \\ (-1)^n \frac{A}{2\sqrt{2m[U(x)-E]}} \exp\left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy \right\}, & \text{при } x > x_1. \end{cases} \quad (2.43)$$

Умова (2.42) визначає стаціонарні стани частинки і називається *правилом квантування Бора-Зоммерфельда*. Квантове число n визначає число вузлів хвильової функції між точками повороту. Квазікласичне наближення справедливе лише на відстанях, для яких між точками повороту укладається декілька довжин хвиль (див. розділ 2.3). Іншими словами, ВКБ-розклад справедливий при великих значеннях n . Стала A фіксується умовою нормування хвильової функції.

2.5. Випадок інфінітного руху. Тунельний ефект

Розглянемо тепер квантову частинку, що знаходиться в потенціалі зображеному на Рис. 11. При цьому будемо вважати, що енергія частинки E менша максимального значення потенціалу



Рис. 10. Нільс Бор, зробив фундаментальний внесок у вивчення структури атомів та створення квантової механіки.

U_{\max} . В класичному випадку така частинка здійснює інфінітний рух, проте вона не може перейти з області $x < x_0$ в область $x > x_1$ і навпаки. Як відомо з курсу “Атомна фізика”, в квантовому випадку ситуація інша й частинка може проникати з однієї області в другу. Зараз розглянемо опис цього явища з допомогою методу ВКБ.

Для визначеності будемо вважати, що частинка падає на потенціал з точки $x \rightarrow -\infty$. Будемо також вважати, що потенціал зникає достатньо швидко на нескінченності: $U(-\infty) = U(\infty) = 0$. В цьому випадку при $x \rightarrow +\infty$ буде

поширюватися плоска хвиля

$$\psi_{\text{асим.}}(x) = N \exp\{+ikx\}, \text{ де } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (2.44)$$

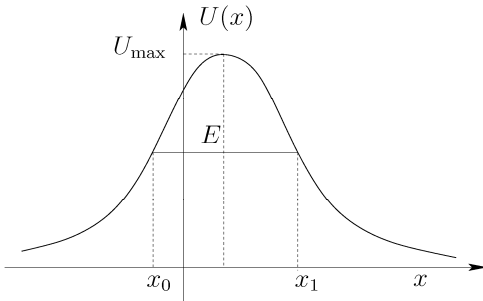


Рис. 11. Частинка виконує інфінітний рух.

На основі методу ВКБ можна записати загальний вираз для хвильової функції:

при $x < x_0$

$$\psi(x) = \frac{C_0}{\sqrt{q(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} q(y) dy} + \frac{C'_0}{\sqrt{q(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} q(y) dy}, \quad (2.45)$$

при $x_0 < x < x_1$

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt[4]{2m[U(x)-E]}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy} + \frac{A'}{\sqrt[4]{2m[U(x)-E]}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy}, \quad (2.46)$$

при $x > x_1$

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{q(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x q(y) dy} + \frac{C_1'}{\sqrt{q(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x q(y) dy}. \quad (2.47)$$

Для того, щоб задовольнити умову (2.44) необхідно покласти $C_1' = 0$. Дійсно, в цьому випадку для фази при $x \rightarrow \infty$ маємо

$$\varphi(x) = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x [q(y) - \hbar k] dy - k(x_0 - x) \rightarrow \varphi_0 + kx, \quad (2.48)$$

де фаза

$$\varphi_0 = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{\infty} [q(y) - \hbar k] dy - kx_0 \quad (2.49)$$

скінченна (тут враховано ту обставину, що потенціал достатньо швидко спадає на нескінченності).

Тепер для того, щоб плавно поєднати функції в точці x_1 необхідно використовувати обидві функції Ейрі. Вводячи змінну

$$\rho = \left(\frac{2Fm}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} (x_1 - x) \text{ бачимо, що хвильова функція біля точки}$$

повороту x_1 справа (при цьому $\rho < 0$) має вигляд

$$\begin{aligned} \psi(x) &\approx \frac{C_1}{\sqrt[4]{-\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F} \right)^{\frac{1}{6}} e^{i\zeta} = \\ &= \frac{C_1}{\sqrt[4]{-\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F} \right)^{\frac{1}{6}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \left[\cos\left(\zeta + \frac{\pi}{4}\right) + i \sin\left(\zeta + \frac{\pi}{4}\right) \right] \approx \\ &\approx \sqrt{\pi} C_1 \left(\frac{1}{2\hbar m F} \right)^{\frac{1}{6}} e^{-i\frac{\pi}{4}} [\text{Bi}(\rho) + i\text{Ai}(\rho)], \end{aligned} \quad (2.50)$$

де використано позначення $\zeta \equiv \frac{2}{3}|\rho|^{\frac{3}{2}}$. Звідси використовуючи асимптотику функцій Ейрі (2.37) отримаємо, що зліва від точки повороту x_1 ($\rho < 0$) хвильова функція є

$$\psi(x) \approx \frac{C_1}{\sqrt[4]{\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F} \right)^{\frac{1}{6}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(e^\zeta + \frac{i}{2} e^{-\zeta} \right). \quad (2.51)$$

В свою чергу, із (2.47) випливає

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt[4]{\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F} \right)^{\frac{1}{6}} (A e^\zeta + i A' e^{-\zeta}), \quad (2.52)$$

де необхідно покласти

$$A = e^{-i\frac{\pi}{4}} C_1 \quad \text{і} \quad A' = \frac{i}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} C_1. \quad (2.53)$$

Тоді в області $x_0 < x < x_1$ хвильову функцію можна переписати у вигляді

$$\begin{aligned} \psi(x) = & e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{C_1}{2} \frac{1}{\sqrt[4]{2m[U(x)-E]}} \times \\ & \times \left\{ \exp \left[-L + \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy \right] - 2i \exp \left[L - \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.54)$$

де використано таке позначення $L = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m[U(y)-E]} dy$. Тепер

поблизу точки x_0 справа, тобто коли $\rho \equiv \left(\frac{2Fm}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} (x-x_0) > 0$, хвильова функція (2.54) запишеться:

$$\begin{aligned} \psi(x) & \approx \frac{C_1}{2\sqrt[4]{\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F} \right)^{\frac{1}{6}} e^{i\frac{\pi}{4}} (e^{-L+\zeta} - 2ie^{L-\zeta}) \approx \\ & \approx \frac{C_1}{2} \left(\frac{1}{2\hbar m F} \right)^{\frac{1}{6}} e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\pi} [e^{-L} \text{Bi}(\rho) - 4ie^L \text{Ai}(\rho)]. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Тепер розпишемо (2.47) в області поблизу точки x_0 зліва

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt[4]{-\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F} \right)^{\frac{1}{6}} (C_0 i e^{i\zeta} + C'_0 e^{-i\zeta}). \quad (2.56)$$

Порівнюючи (2.55) з (2.56) отримаємо

$$C_0 = i \frac{C_1}{4} (e^{-L} - 4e^L) \text{ і } C'_0 = \frac{C_1}{4} (e^{-L} + 4e^L). \quad (2.57)$$

Тепер розрахуємо коефіцієнт проходження через бар'єр

$$D = \frac{|C_1|^2}{|C'_0|^2} = \frac{e^{-2L}}{\left(1 + \frac{1}{4}e^{-2L}\right)^2}. \quad (2.58)$$

Якщо бар'єр достатньо широкий, то експонентою в знаменнику можна знехтувати, і для коефіцієнта проходження отримаємо

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m[U(y) - E]} dy \right\}. \quad (2.59)$$

Відповідно коефіцієнт відбиття $R = 1 - D$.

Задачі

2.1. Методом квазікласичного наближення знайти енергетичний спектр частинки, яка знаходиться у потенціальному полі гармонічного осцилятора $U(x) = \frac{\kappa}{2} x^2$, де κ - коефіцієнт жорсткості осцилятора.

2.2. Як зміниться умова квантування Бора-Зомерфельда для потенціалу (Рис. 12)

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

Знайти хвильові функції у квазікласичному наближенні.

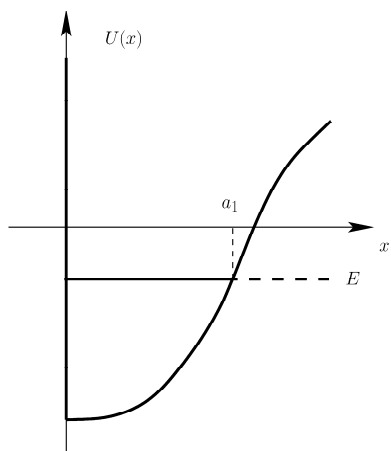


Рис. 12. До Задачі 2.2.

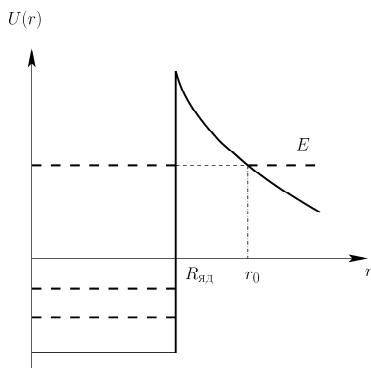


Рис. 13. Потенціал, в якому знаходиться α -частинка у ядрі. Якщо її енергетичний рівень від'ємний, $E < 0$, то вона не може покинути ядро. Якщо ж $E > 0$, то α -частинка внаслідок тунельного ефекту може проникнути крізь бар'єр.

2.3. Методом квазікласичного квантування знайти рівні енергії частинки, яка знаходиться у полі

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

Розв'язати задачу точно та порівняти з результатом квазікласичного наближення для трьох нижніх рівнів.

2.4. Г.Гамов запропонував механізм α -розпаду ядер виходячи з теорії тунельного ефекту. При цьому вважається, що всередині ядра α -частинка рухається у самоузгодженому ядерному потенціалі, а зовні – у кулонівському полі відштовхування між α -частинкою та залишком ядра. Розрахувати ймовірність розпаду апроксимуючи ядерний потенціал потенціалом прямокутної ями (Рис. 13). Вважати, що $r_0 \ll R_{\text{яд}}$.

РОЗДІЛ 3. ТЕОРІЯ ПРЕДСТАВЛЕНЬ

3.1. Матрична форма квантової механіки

До цієї пори розглядався математичний апарат квантової механіки, який базується на диференціальних лінійних ермітових операторах. Проте можливий інший спосіб, оснований на представленні фізичних величин у вигляді матриць.

Почнемо з того, що покажемо, як довільному лінійному оператору \hat{F} можна співставити матрицю F . Розглянемо для простоти випадок, коли система має дискретний спектр стаціонарних станів іншого оператора \hat{R} , який описує вимірювану фізичну величину R . Далі покажемо, як такий підхід узагальнюється на випадок неперервного спектра.

Як уже зазначалося вище, існування оператора \hat{F} означає, що сформульований закон співставлення довільної функції $\psi(\xi)$ іншій функції $\varphi(\xi)$

$$\varphi(\xi) = \hat{F}\psi(\xi). \quad (3.1)$$

Нехай $\psi_n(\xi)$ представляє собою набір усіх власних функцій оператора \hat{R} . Під ξ розуміється набір усіх координат, які описують відповідну квантову систему. Скористаємося умовою повноти для набору функцій $\psi_n(\xi)$ і розкладемо по них функції $\varphi(\xi)$ і $\psi(\xi)$

$$\psi(\xi) = \sum_n C_n \psi_n(\xi), \quad \varphi(\xi) = \sum_m C'_m \psi_m(\xi). \quad (3.2)$$

При цьому сукупність комплексних чисел C_n і C'_m можна представити у вигляді стовпців

$$C = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad C' = \begin{pmatrix} C'_1 \\ C'_2 \\ \vdots \\ C'_m \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Очевидно, що задання наборів чисел $\{C_n\}$ і $\{C'_m\}$ повністю еквівалентно заданню функцій $\varphi(\xi)$ і $\psi(\xi)$. Тому не втрачаючи загальності матриці-стовпці C і C' можна розглядати як спеціальний запис хвильових функцій $\varphi(\xi)$ і $\psi(\xi)$.

Підставимо (3.2) в (3.1), потім помножимо зліва отриманий вираз на $\psi_k^*(\xi)$ і проінтегруємо по всіх координатах dV . В результаті отримаємо

$$C'_k = \sum_n F_{kn} C_n, \quad (3.4)$$

де

$$F_{kn} = \int dV \psi_k^*(\xi) \hat{F} \psi_n(\xi) \quad \text{і} \quad dV = d\xi_1 \dots d\xi_r. \quad (3.5)$$

При виводі (3.4) була використана ортонормованість хвильових функцій $\psi_n(\xi)$:

$$\int dV \psi_m^*(\xi) \psi_n(\xi) = \delta_{mn}. \quad (3.6)$$

Якщо представити величини F_{kn} у вигляді матриці

$$F = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \dots & F_{1n} & \dots \\ F_{21} & F_{22} & \dots & F_{2n} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ F_{m1} & F_{m2} & \dots & F_{mn} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

і скористатися матрицями-стовпцями (3.3), то співвідношення (3.4) можуть бути записані в компактній формі

$$C' = FC. \quad (3.8)$$

Звичайно, (3.8) повністю еквівалентне (3.1). Це означає, що в квантовій механіці одна фізична величина може бути описана в різних *представленнях*. Представлення, яке використовується в (3.1) називають координатним, а представлення, яке використовується в (3.8) називають R -представленням. Елемент матриці (3.7) F_{kn} називають матричним елементом переходу із стану n в стан k .

Тепер обчислимо середнє значення фізичної величини F в матричному представленні

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle &\equiv \int dV \psi^*(\xi) \hat{F} \psi(\xi) = \sum_{k,n} C_k^* C_n \int dV \psi_k^*(\xi) \hat{F} \psi_n(\xi) = \\ &= \sum_{k,n} C_k^* F_{kn} C_n = C^\dagger F C, \end{aligned} \quad (3.9)$$

де C^\dagger являється матрицею-рядком ермітово спряженою матриці-стовпчику C ,

$$C^\dagger = (C_1^*, C_2^*, \dots, C_k^*, \dots). \quad (3.10)$$

Умова нормування при цьому має вигляд

$$C^\dagger C = 1. \quad (3.11)$$

Розглянемо випадок, коли $\psi_n(\xi)$ являються власними функціями оператора \hat{F} . В цьому випадку можна говорити про оператор \hat{F} , заданий в F -представленні. Легко бачити, що матриця (3.7) перетворюється на діагональну

$$F = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & f_2 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & f_n & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

де $f_1, f_2, \dots, f_n, \dots$ - власні значення оператора \hat{F} . Нормованими власними функціями цього оператора, які відповідають власним значенням $f_1, f_2, \dots, f_n, \dots$, будуть матриці-стовпці

$$C_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad C_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad C_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots \quad (3.13)$$

Відмітимо, що вимога ермітовості оператора \hat{F} приводить до вимоги ермітовості матриці F :

$$F_{kn} = F_{nk}^*. \quad (3.14)$$

3.2. Вектор стану як вектор в гільбертовому просторі

З матричної точки зору, матриці-стовпці (3.3), які, як уже говорилося раніше, повністю еквівалентні хвильовій функції $\psi(\xi)$, можна розглядати як вектори в комплексному просторі, кількість вимірів якого $n \rightarrow \infty$. Скалярний добуток двох таких векторів C і C' визначається як

$$(C', C) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n'^* C_n. \quad (3.15)$$

Нагадаємо, що хвильові функції $\psi(\xi)$ і $\varphi(\xi)$ (які відповідають векторам C і C'), також можна розглядати як вектори гільбертового простору з скалярним добутком

$$(\varphi, \psi) = \int dV \varphi^*(\xi) \psi(\xi). \quad (3.16)$$

При цьому інтегрування по неперервних змінних $d\xi_1, \dots, d\xi_r$ в (3.16) відповідає сумуванню по дискретним змінним в (3.15).

Підставляючи розклад (3.2) в (3.16) і використовуючи ортонормованість функцій (3.6), отримаємо, що скалярний добуток не залежить від представлення:

$$(\varphi, \psi) = (C', C). \quad (3.17)$$

Розглянемо перехід від одного представлення до іншого і покажемо, що геометрично цей перехід відповідає переходу від

однієї системи координат в гільбертовому просторі до іншої системи координат.

Нехай $\psi_n(\xi)$ і $\tilde{\psi}_m(\xi)$ – два набори ортонормованих власних функцій операторів \hat{F} і $\hat{\tilde{F}}$, відповідно:

$$\hat{F}\psi_n(\xi) = f_n\psi_n(\xi), \quad \hat{\tilde{F}}\tilde{\psi}_m(\xi) = \tilde{f}_m\tilde{\psi}_m(\xi). \quad (3.18)$$

Розкладемо функції $\tilde{\psi}_m(\xi)$ по $\psi_n(\xi)$:

$$\tilde{\psi}_m(\xi) = \sum_n U_{nm}\psi_n(\xi). \quad (3.19)$$

При цьому коефіцієнти розкладу U_{nm} можна розглядати як скалярний добуток векторів $\psi_n(\xi)$ і $\tilde{\psi}_m(\xi)$

$$U_{nm} = (\psi_n, \tilde{\psi}_m) = \int dV \psi_n^*(\xi) \tilde{\psi}_m(\xi). \quad (3.20)$$

Тепер розглянемо, які властивості має матриця U . З цією метою розпишемо умову ортонормованості функцій $\tilde{\psi}_m(\xi)$:

$$\begin{aligned} \int dV \tilde{\psi}_{m'}^*(\xi) \tilde{\psi}_m(\xi) &= \int dV \sum_{n'} U_{n'm'}^* \psi_{n'}^*(\xi) \sum_n U_{nm} \psi_n(\xi) = \\ &= \sum_n \sum_{n'} \delta_{nn'} U_{nm}^* U_{nm} = \sum_n U_{nm}^* U_{nm} = \\ &= \sum_n (U^\dagger)_{m'n} U_{nm} = \delta_{mm'}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

В матричній формі умову (3.21) можна записати як

$$U^\dagger U = 1 \quad \text{або} \quad U^\dagger = U^{-1}. \quad (3.22)$$

Іншими словами матриця U повинна бути унітарною.

Знайдемо зв'язок між векторами стану в F і \tilde{F} представленнях. Нехай довільна функція має наступний розклад по власним функціям двох операторів

$$\psi(\xi) = \sum_n C_n \psi_n(\xi) = \sum_m \tilde{C}_m \tilde{\psi}_m(\xi) \quad (3.23)$$

Використовуючи (3.19), отримаємо

$$\sum_n C_n \psi_n(\xi) = \sum_{m,n} \tilde{C}_m U_{nm} \psi_n(\xi). \quad (3.24)$$

Звідки

$$C_n = \sum_m U_{nm} \tilde{C}_m, \quad (3.25)$$

або в матричному вигляді

$$C = U\tilde{C}. \quad (3.26)$$

З іншої сторони, домножуючи (3.26) зліва на U^{-1} і користуючись унітарністю матриці U , отримаємо

$$\tilde{C} = U^\dagger C. \quad (3.27)$$

Співвідношення (3.26) і (3.27) показують, що матрицю U можна розглядати як матрицю “обертання” в нескінченновимірному просторі, а перехід від одного вектора стану C до іншого вектору стану C' відповідає переходу від однієї системи координат до іншої.

Знайдемо також перетворення довільної матриці R при переході від одного представлення до іншого. Припустимо, що ця матриця переводить вектор C в вектор C'

$$C' = RC. \quad (3.28)$$

В свою чергу нехай ці вектори зв'язані з іншими векторами \tilde{C}' і \tilde{C}

$$\tilde{C}' = UC' \text{ і } \tilde{C} = UC \quad (3.29)$$

де U - унітарна матриця. Зворотній перехід

$$C' = U^\dagger \tilde{C}' \text{ і } C = U^\dagger \tilde{C}. \quad (3.30)$$

Помноживши зліва співвідношення (3.28), отримаємо:

$$UC' = \tilde{C}' = URC = URU^\dagger U\tilde{C} = \tilde{R}\tilde{C}', \quad (3.31)$$

де

$$\tilde{R} = URU^\dagger = URU^{-1} \text{ або } R = U^\dagger \tilde{R}U. \quad (3.32)$$

Легко переконатися, що унітарне перетворення (3.32) має наступні властивості:

1. Воно переводить ермітову матрицю A в ермітову матрицю \tilde{A} . Дійсно, якщо $\tilde{A} = UAU^{-1}$, то

$$\tilde{A}^\dagger = (UAU^{-1})^\dagger = (U^{-1})^\dagger A^\dagger U^\dagger = UAU^{-1} = \tilde{A} \quad (3.33)$$

2. Воно зберігає матричні рівняння, наприклад:

$$A + B = D \text{ переводить в } \tilde{A} + \tilde{B} = \tilde{D} \quad (3.34)$$

$$AB = D \text{ переводить в } \tilde{A}\tilde{B} = \tilde{D} \text{ і т.д.} \quad (3.35)$$

Доведемо рівність (3.34). Нехай $\tilde{A} = UAU^{-1}$ і $\tilde{B} = UBU^{-1}$. Тоді

$$\tilde{A} + \tilde{B} = UAU^{-1} + UBU^{-1} = U(A+B)U^{-1} = UDU^{-1} = \tilde{D} \quad (3.36)$$

Аналогічно можна довести справедливність (3.35)

$$\tilde{A}\tilde{B} = UAU^{-1}UBU^{-1} = UABU^{-1} = UDU^{-1} = \tilde{D}. \quad (3.37)$$

3. Воно не змінює слід матриці

$$\text{Tr } A = \text{Tr } \tilde{A}. \quad (3.38)$$

4. Воно не змінює детермінант матриці

$$\det A = \det \tilde{A}. \quad (3.39)$$

Із другої властивості випливає, що комутаційні співвідношення між матрицями, що описують відповідні фізичні величини, не залежать від конкретного представлення.

Крім того, спектр власних значень матриць залишається незмінним при унітарних перетвореннях. Дійсно, нехай f - власне значення матриці F , яке відповідає власній функції C

$$FC = fC. \quad (3.40)$$

Домножуючи зліва цю рівність на унітарну матрицю U отримаємо

$$UFC = UFU^{-1}UC = \tilde{F}\tilde{C} = fUC = f\tilde{C}. \quad (3.41)$$

Аналогічна властивість має місце і для матричних елементів переходів

$$C_n^\dagger FC_m = C_n^\dagger U^{-1}UFU^{-1}UC_m = \tilde{C}_n^\dagger \tilde{F}\tilde{C}_m.$$

Таким чином робимо висновок, що фізичній величині може бути поставлено у відповідність нескінченна кількість матриць, які відрізняються унітарним перетворенням. При цьому всі фізичні відповіді не залежать від конкретного представлення. Питання вибору представлення є питанням зручності і вирішується в залежності від особливостей конкретної фізичної задачі.

3.3. Неперервні матриці

Поки що розвинута теорія представлень виявляється неповною, оскільки вона не застосовна до операторів, які мають неперервний спектр. Прикладом може бути спектр власних значень імпульсу вільної частинки. Зараз формалізм буде узагальнений на оператори з неперервним спектром.

В цьому випадку будемо розглядати компоненти матриць-стовпців (3.3) C_n і C'_m , як функції від неперервної змінної η : $C(\eta)$ і $C'(\eta)$. При цьому сумування в скалярному добутку двох векторів (3.15) необхідно замінити на інтегрування

$$(C', C) = C'^* C = \sum_n C_n'^* C_n \Rightarrow (C', C) = \int d\eta C'^*(\eta) C(\eta). \quad (3.42)$$

Тут і далі інтегрування проводиться по всім значенням спектра η .

Роль матриці F тепер буде грати функція від двох змінних $F(\eta, k)$, причому добуток двох “матриць” $A(\eta, \eta')$ і $B(k, k')$ перетвориться в наступний інтеграл

$$\begin{aligned} (F)_{nm} &= (AB)_{nm} = \sum_k A_{nk} B_{km} \Rightarrow \\ &\Rightarrow F(\eta, k) = \int d\lambda A(\eta, \lambda) B(\lambda, k). \end{aligned} \quad (3.43)$$

Роль одиничної матриці буде грати δ -функція.

Легко бачити, що всі інші результати попереднього розділу узагальнюються на випадок неперервних матриць. Далі покажемо це на прикладах операторів координати і імпульсу, але спочатку варто познайомитися з корисними позначеннями Дірака для векторів стану, які часто використовуються в квантовій механіці. Їх зручність виявиться далі.

3.4. Вектори “кет” і “бра”

Хвильову функцію ψ позначають символом $|\psi\rangle$, який називають “кет”-вектор. Цей символ зображує половинку скалярного добутку двох векторів стану, які ми обговорювали вище. Різниця лише в тому, що тут кругла дужка замінена на “трикутну”. Якщо хвильова функція відповідає певним значенням квантових чисел (наприклад, в задачі про рух частинки в центральному полі такими квантовими числами можуть бути n , l і m – головне, орбітальне і магнітне квантові числа, див. Розділ 5), то тоді просто пишуть $|nlm\rangle$. Друга “половинка” скалярного добутку зображається символом $\langle\psi|$ і позначає комплексно-

спряжений вектор ψ^* . Він називається “бра”-вектором. Самі слова бра і кет походять від “розрізання” англійського слова bracket (дужка):

$$\langle \text{bra} | \text{ket} \rangle, \quad (3.44)$$

в якому вертикальна лінія викреслює букву “с”.

В матричному представленні кет-вектор представляє стовпчик, а бра-вектор рядок. Скалярний добуток (3.16) двох векторів стану $\psi(\xi)$ і $\psi_n(\xi)$ (де $\psi_n(\xi)$ - власні функції оператора \hat{F}) запишеться через кет- і бра-вектори як

$$\langle \psi_n | \psi \rangle \equiv \langle n | \psi \rangle = \int dV \psi_n^*(\xi) \psi(\xi) \quad (3.45)$$

і представляє собою не що інше, як елемент з набору коефіцієнтів $\{C_n\}$ розкладу (3.2). В матричному представленні ми їх записували як матрицю-стовпчик C в формулі (3.3). Як вже зазначалося, її можна інтерпретувати як функцію $\psi(\xi)$ в F -представленні. Геометрично скалярний добуток (3.45) можна інтерпретувати як проєкцію вектора стану $|\psi\rangle$ на “вісь” $|n\rangle$.

У випадку, якщо спектр оператора \hat{F} неперервний, скалярний добуток

$$\langle \psi_\eta | \psi \rangle \equiv \langle \eta | \psi \rangle \quad (3.46)$$

представляє функцію $C(\eta)$ (яку можна розглядати як неперервну матрицю-стовпчик) і замість суми в розкладі (3.2) потрібно написати інтеграл

$$\psi(\xi) = \int d\eta C(\eta) \psi_\eta(\xi). \quad (3.47)$$

Введені позначення виявляються універсальними і можуть використовуватися як для дискретних, так і для неперервних матриць.

Кет- і бра-вектори дозволяють “не задумуючись” переходити від одного представлення до іншого. Наприклад, перехід від F -представлення до нового A -представлення (власні значення оператора \hat{A} позначимо a) запишеться

$$\langle a|\psi\rangle = \begin{cases} \sum_n \langle a|n\rangle \langle n|\psi\rangle, \\ \int d\eta \langle a|\eta\rangle \langle \eta|\psi\rangle, \end{cases} \quad (3.48)$$

відповідно для дискретного спектру f_n і для неперервного спектру f_η . Таким чином, вираз $\sum_f |f\rangle \langle f|$ слід розглядати як одиничну матрицю

$$\sum_f |f\rangle \langle f| = 1. \quad (3.49)$$

Тут і далі символ суми означає сумування по дискретному спектру або інтегрування по неперервному спектру. Таким чином для переходу від одного представлення до іншого достатньо вписати у відповідний скалярний добуток одиницю і розкласти її з допомогою (3.49) по необхідним векторам.

Розглянемо для прикладу скалярний добуток вектора стану самого на себе

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int d^3x \langle \psi|\bar{x}\rangle \langle \bar{x}|\psi\rangle = \int d^3x |\psi(\bar{x})|^2. \quad (3.50)$$

Тут на першому етапі між бра- і кет-векторами була вставлена $1 = \int dx |\langle \bar{x}|\bar{x}\rangle$ і далі використано те, що

$$\psi(\bar{x}) \equiv \langle \bar{x}|\psi\rangle \quad \text{і} \quad \psi^*(\bar{x}) = \langle \psi|\bar{x}\rangle. \quad (3.51)$$

Далі подивимося на прикладах, як можна продовжити таку “гру” для ряду важливих операторів.

Оператори координати та імпульсу.

По означенню координатне представлення – це таке представлення, в якому оператор координати діагональний

$$\langle \bar{x}|\hat{x}|\bar{x}'\rangle = \bar{x}\delta(\bar{x} - \bar{x}'). \quad (3.52)$$

Хвильова функція в цьому представленні задана в (3.51). Для того щоб знайти дію оператора координати на хвильову функцію скористаємось розкладом (3.52). В результаті отримаємо

$$\begin{aligned}\langle \bar{x} | \hat{x} | \psi \rangle &= \int d^3 x' \langle \bar{x} | \hat{x} | \bar{x}' \rangle \langle \bar{x}' | \psi \rangle = \\ &= \bar{x} \int d^3 x' \delta(\bar{x} - \bar{x}') \psi(\bar{x}') = \bar{x} \psi(\bar{x}),\end{aligned}$$

тобто дія оператора координати є просто множенням на \bar{x} .

Тепер знайдемо оператор імпульсу в x -представленні. Будемо виходити з того, що повинно виконуватися комутаційне співвідношення між операторами координати \hat{x}_i та імпульсу \hat{p}_j :

$$\hat{p}_j \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}.$$

Це співвідношення в матричному вигляді виглядає як

$$\begin{aligned}& \int d^3 x'' \{ \langle \bar{x} | \hat{p}_j | \bar{x}'' \rangle \langle \bar{x}'' | \hat{x}_i | \bar{x}' \rangle - \langle \bar{x} | \hat{x}_i | \bar{x}'' \rangle \langle \bar{x}'' | \hat{p}_j | \bar{x}' \rangle \} = \\ &= \int d^3 x'' \{ x_i'' \delta(\bar{x}'' - \bar{x}') \langle \bar{x} | \hat{p}_j | \bar{x}'' \rangle - x_i \delta(\bar{x} - \bar{x}'') \langle \bar{x}'' | \hat{p}_j | \bar{x}' \rangle \} = \quad (3.53) \\ &= -(x_i - x_i') \langle \bar{x} | \hat{p}_j | \bar{x}' \rangle = \frac{\hbar}{i} \delta(\bar{x} - \bar{x}') \delta_{ij}.\end{aligned}$$

Покажемо, що матриця імпульсу, яка задовольняє цьому співвідношенню, має вигляд:

$$\langle \bar{x} | \hat{p}_j | \bar{x}' \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta(\bar{x} - \bar{x}'). \quad (3.54)$$

Дійсно, підставляючи цей вираз в ліву частину (3.53) і використовуючи рівність (див. Задачу 3.1) $x \frac{d}{dx} \delta(x) = -\delta(x)$, отримаємо:

$$-\frac{\hbar}{i} (x_i - x_i') \frac{\partial}{\partial x_j} \delta(\bar{x} - \bar{x}') = \frac{\hbar}{i} \delta(\bar{x} - \bar{x}') \delta_{ij}, \quad (3.55)$$

що і треба було довести.

Із (3.54) видно, що дія матриці імпульсу на функцію $\psi(\bar{x})$ зводиться до оператора диференціювання

$$\int d^3 x' \langle \bar{x} | \hat{p}_j | \bar{x}' \rangle \langle \bar{x}' | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \int d^3 x' \delta(\bar{x} - \bar{x}') \langle \bar{x}' | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(\bar{x}).$$

Розглянемо тепер набір функцій, які є власними функціями матриці (3.54) з власними значеннями \vec{p} . З цією метою введемо унітарну матрицю

$$\langle \vec{p} | \vec{x} \rangle = U(\vec{p}, \vec{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}. \quad (3.56)$$

Обернене перетворення є:

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = [U(\vec{p}, \vec{x})]^{-1} = U^*(\vec{x}, \vec{p}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{+\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}.$$

Перетворення (3.56) переводить вектор стану в новий згідно

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) \rightarrow \tilde{\psi}(\vec{p}) &= \langle \vec{p} | \psi \rangle = \int d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle = \\ &= \int d^3x U(\vec{p}, \vec{x}) \psi(\vec{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}). \end{aligned}$$

Легко бачити, що це є ніщо інше, як фур'є-образ початкової хвильової функції $\psi(\vec{x})$.

Тепер у відповідності з загальними “правилами гри” з векторами кет і бра перетворимо матрицю (3.54) оператора імпульсу

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | \hat{p} | \vec{p}' \rangle &= \int d^3x d^3x' \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \hat{p} | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \vec{p}' \rangle = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3x d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} [\delta(\vec{x} - \vec{x}')] e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}'}. \end{aligned}$$

Використаємо правило інтегрування з похідною від δ -функції

$$\int dx f(x) \delta'(x) = -f'(0)$$

і отримаємо

$$\langle \vec{p} | \hat{p} | \vec{p}' \rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \vec{p} \int d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{x}'} = \vec{p} \delta(\vec{p} - \vec{p}').$$

Отже, матриця оператора імпульсу перетворюється в діагональну матрицю, а її дія на вектор стану зводиться до множення на \vec{p} .

Тепер подивимося, як перетворюється матриця оператора координати:

$$\begin{aligned} \langle \bar{x} | \hat{x} | \bar{x}' \rangle &\rightarrow \langle \bar{p} | \hat{x} | \bar{p}' \rangle = \int d^3 x d^3 x' \langle \bar{p} | \bar{x} \rangle \langle \bar{x} | \hat{x} | \bar{x}' \rangle \langle \bar{x}' | \bar{p}' \rangle = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3 x d^3 x' e^{-\frac{i}{\hbar} \bar{p} \cdot \bar{x}} \bar{x} \delta(\bar{x} - \bar{x}') e^{+\frac{i}{\hbar} \bar{p}' \cdot \bar{x}'} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{p}} \delta(\bar{p} - \bar{p}'). \end{aligned}$$

Легко виявити, що його дія на вектор стану $\tilde{\psi}(\bar{p})$ зводиться до операції диференціювання

$$\begin{aligned} \int d^3 p' \langle \bar{p} | \hat{x} | \bar{p}' \rangle \langle \bar{p}' | \psi \rangle &= -\frac{\hbar}{i} \int d^3 p' \left[\frac{\partial}{\partial \bar{p}} \delta(\bar{p} - \bar{p}') \right] \tilde{\psi}(\bar{p}') = \\ &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{p}} \int d^3 p' \delta(\bar{p} - \bar{p}') \tilde{\psi}(\bar{p}') = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{p}} \tilde{\psi}(\bar{p}). \end{aligned}$$

3.5. Зміна стану з часом

Тепер розглянемо, як за допомогою унітарних перетворень можна описати зміну системи з часом. При цьому виявляється, що для такого опису можна використовувати різні представлення. Найбільш популярними з них є так звані *представлення Шррьодінгера*, *представлення Гайзенберга* і *представлення взаємодії*, які зараз і розглянемо.

3.5.1. Представлення Шррьодінгера

В представленні Шррьодінгера такі оператори, як координата \hat{x} та імпульс \hat{p} , вважаються незалежними від часу, а залежність від часу містить хвильова функція $\Psi_{\text{ш}}(\bar{x}, t)$, причому ця залежність описується за допомогою унітарного оператора еволюції (1.48). Докладніше цей опис вже розглядалося в Розділі 1.

3.5.2. Представлення Гайзенберга

В представленні Гайзенберга залежність від часу переноситься на оператори фізично вимірюваних величин, в той час як хвильова функція не залежить від часу, а лише від координати. Очевидно, що такий опис можна реалізувати

розглядаючи хвильову функцію в представленні Гайзенберга $\psi_{\Gamma}(\vec{x})$, як хвильову функцію у представленні Шрьодінгера в момент часу $t = 0$. Тому слід написати

$$\psi_{\Gamma}(\vec{x}) = \hat{S}^{-1}(t) \Psi_{\text{Ш}}(\vec{x}, t), \quad (3.57)$$

де $\hat{S}^{-1}(t)$ - оператор, обернений до оператора еволюції (1.47).

Згідно загальних правил, оператори \hat{F}_{Γ} і $\hat{F}_{\text{Ш}}$, задані в представленнях Гайзенберга і Шрьодінгера, пов'язані відповідно

$$\hat{F}_{\Gamma} = \hat{S}^{-1}(t) \hat{F}_{\text{Ш}} \hat{S}(t). \quad (3.58)$$

При цьому обидва оператори співпадають в момент часу $t = 0$. Це означає, що формулу (3.58) можна розглядати як формулу для еволюції оператора в представленні Гайзенберга

$$\hat{F}(t + \Delta t) = \hat{S}^{-1}(\Delta t) \hat{F}(t) \hat{S}(\Delta t), \quad (3.59)$$

де обидва оператора F відносяться до представлення Гайзенберга і тому індекс представлення у них пропущений.

Підставимо в (3.59) явний вид оператора еволюції (1.47) і розглянемо зміну оператора за нескінченно малий проміжок часу

$$\hat{F}(t + \Delta t) = \hat{F}(t) + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}(t)] \Delta t + O(\Delta t^2). \quad (3.60)$$

Звідки одразу випливає, що

$$\frac{d\hat{F}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}(t)]. \quad (3.61)$$

Отже, всі оператори, що комутовують з оператором Гамільтона \hat{H} , не змінюються з часом. Крім того, оскільки в момент часу $t = 0$ оператори в представленні Гайзенберга і Шрьодінгера співпадають, то оператори, що комутують з гамільтоніаном, не змінюються при переході від одного з цих представлень до іншого. Це твердження відноситься і до самого гамільтоніана.

3.5.3. Представлення взаємодії

У випадку взаємодіючих систем зручно користуватися представленням взаємодії. Розіб'ємо гамільтоніан на дві частини

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (3.62)$$

де \hat{H}_0 – оператор Гамільтона незваємодіючих частин квантової системи, а \hat{V} – оператор їх взаємодії. В цьому представленні хвильову функцію $\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t)$ визначається через хвильову функцію в представленні Шрьодінгера за допомогою наступного унітарного перетворення

$$\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t) = \hat{U}(t) \Psi_{\text{III}}(\vec{x}, t), \quad (3.63)$$

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right). \quad (3.64)$$

Визначимо рівняння для функції $\Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t)$. Підставляючи в рівняння Шрьодінгера хвильову функцію

$$\Psi_{\text{III}}(\vec{x}, t) = \hat{U}^{-1}(t) \Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t) \quad (3.65)$$

отримаємо

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{U}^{-1}(t)}{\partial t} \Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t) + i\hbar \hat{U}^{-1}(t) \frac{\partial \Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t)}{\partial t} = \\ = \hat{H}_0 \hat{U}^{-1}(t) \Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t) + \hat{V} \hat{U}^{-1}(t) \Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t). \end{aligned}$$

На основі (3.64) робимо висновок, що

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}^{-1}(t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \hat{U}^{-1}(t). \quad (3.66)$$

Отже, (3.65) зводиться до

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t)}{\partial t} = \hat{U}(t) \hat{V} \hat{U}^{-1}(t) \Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t). \quad (3.67)$$

Згідно з загальним принципом величина $\hat{U}(t) \hat{F}_{\text{III}} \hat{U}^{-1}(t)$ представляє собою оператор \hat{F} в представленні взаємодії,

$$\hat{F}(t)_{\text{вз.}} = \hat{U}(t) \hat{F}_{\text{III}} \hat{U}^{-1}(t). \quad (3.68)$$

Тому рівняння (3.67) перетворюється у рівняння

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t)}{\partial t} = \hat{V}_{\text{вз.}} \Psi_{\text{вз.}}(\vec{x}, t), \quad (3.69)$$

яке схоже на рівняння Шрьодінгера, в якому гамільтоніан замінений на оператор взаємодії в представленні взаємодії.

Диференціальне рівняння, що описує розвиток оператора з часом в представленні взаємодії, отримуємо з (3.68) шляхом диференціювання по часу:

$$\frac{d\hat{F}_{\text{вз}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{F}_{\text{вз}}].$$

Задачі

3.1. Довести рівність $x \frac{d}{dx} \delta(x) = -\delta(x)$.

3.2. Знайти хвильову функцію Задачі (1.12) в імпульсному представленні.

3.3. Знайти дію оператора інверсії на хвильову функцію в імпульсному просторі.

3.4. Знайти оператори координати та імпульсу в представленні Гайзенберга для вільної частинки.

РОЗДІЛ 4. ОПЕРАТОР МОМЕНТУ КІЛЬКОСТІ РУХУ В МАТРИЧНОМУ ПРЕДСТАВЛЕНІ

4.1. Знаходження матричних елементів компонент оператора моменту кількості руху

Із аналогії з класичною механікою оператор моменту кількості руху можна записати у вигляді

$$\hat{L} = \frac{\hbar}{i} \vec{x} \times \nabla. \quad (4.1)$$

При цьому легко показати, що для його компонент справедливі наступні комутаційні співвідношення

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k. \quad (4.2)$$

(Тут і далі ε_{ijk} - повністю антисиметричний тензор, в якого $\varepsilon_{123} = +1$; крім того вважається, що по індексу, який співпадає,

виконується сумування, наприклад: $\varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \equiv \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k$.) Проте при

описанні власного моменту кількості руху частинки (спіну) користуватися виразом (4.1) неможливо. Дійсно, спін відсутній в класичній механіці, і тому для визначення відповідного оператора не можна користуватися аналогією з класичною механікою. Єдине, що можна допустити, це те, що для оператора спіну комутаційні співвідношення (4.2) залишаються справедливими. Тому зараз спробуємо розвинути теорію моменту кількості руху лише на основі комутаційних співвідношень, не уточнюючи при цьому конкретний вид операторів. Для цього використаємо матричне формулювання.

Надалі, говорячи про довільний момент кількості руху, будемо використовувати символ \hat{J} . За символом \hat{L} залишимо позначення орбітального моменту, тобто такого моменту, який пов'язаний з просторовим рухом частинки. Із комутаційних співвідношень

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \quad (4.3)$$

впливає, що квадрат моменту $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ комутує з будь-якою з його проєкцій

$$\left[\hat{J}^2, \hat{J}_x \right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_y \right] = \left[\hat{J}^2, \hat{J}_z \right] = 0. \quad (4.4)$$

Будемо далі працювати в представленні, де діагональні матриці \hat{J}^2 і \hat{J}_z . (Можна довести в загальному випадку, що якщо два оператора комутують, то завжди можна знайти таке представлення, де вони обидва діагональні). Тому будемо нумерувати спільні власні функції цих операторів двома числами j і m , де j характеризує квадрат моменту, а власне значення J_z оператора \hat{J}_z задається числом m , а саме $J_z = \hbar m$. Власні значення оператора \hat{J}^2 будемо позначати A_j . Для відповідних власних функцій будемо використовувати позначення Дірака $|jm\rangle$. Таким чином матриці операторів \hat{J}^2 і \hat{J}_z будуть діагональні по j і m , а матриці операторів \hat{J}_x і \hat{J}_y - діагональні по j і недіагональні по m

$$\langle j'm' | \hat{J}^2 | jm \rangle = A_j \delta_{jj'} \delta_{mm'}, \quad (4.5)$$

$$\langle j'm' | \hat{J}_x | jm \rangle = (J_x)_{mm'} \delta_{jj'}, \quad \langle j'm' | \hat{J}_y | jm \rangle = (J_y)_{mm'} \delta_{jj'}, \quad (4.6)$$

$$\langle j'm' | \hat{J}_z | jm \rangle = \hbar m \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \quad (4.7)$$

Потрібно знайти спектр значень A_j і m , а також встановити матриці $(J_x)_{mm'}$ і $(J_y)_{mm'}$.

Перш за все відмітимо, що при фіксованому j значення m обмежені. Для того щоб це довести, розглянемо наступні матричні елементи:

$$\langle j'm' | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | jm \rangle = (A_j - \hbar^2 m^2) \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \quad (4.8)$$

Вони рівні

$$\begin{aligned}
\langle j'm' | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 | jm \rangle &= \sum_{m''} \left[(J_x)_{m'm''} (J_x)_{m''m} + (J_y)_{m'm''} (J_y)_{m''m} \right] \delta_{mm'} \delta_{jj'} = \\
&= \sum_{m''} \left[(J_x)_{m'm''} (J_x)_{mm''}^* + (J_y)_{m'm''} (J_y)_{mm''}^* \right] \delta_{mm'} \delta_{jj'} = \\
&= \sum_{m''} \left[|(J_x)_{m'm''}|^2 + |(J_y)_{m'm''}|^2 \right] \delta_{mm'} \delta_{jj'}.
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Тут було використано ермітовість матричних елементів $(J_x)_{mm'}$ і $(J_y)_{mm'}$, а також те, що цей вираз діагональний по m і m' .

Порівнюючи праві частини (4.8) і (4.9), робимо висновок, що

$$A_j \geq (\hbar m)^2 \quad \text{або} \quad -\sqrt{A_j} \geq \hbar m \geq \sqrt{A_j}. \tag{4.10}$$

Введемо допоміжні оператори

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y. \tag{4.11}$$

Із (4.3) випливають їх комутаційні співвідношення

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{J}_{\pm}, \tag{4.12}$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_z. \tag{4.13}$$

Перепишемо комутаційне співвідношення (4.12) в матричному вигляді. Враховуючи те, що всі матричні елементи діагональні по j , далі будемо розглядати лише випадок $j = j'$. Для лівої частини маємо:

$$\begin{aligned}
&\langle jm' | \hat{J}_z \hat{J}_{\pm} | jm \rangle - \langle jm' | \hat{J}_{\pm} \hat{J}_z | jm \rangle = \\
&= \sum_{m''} \left\{ \langle jm' | \hat{J}_z | jm'' \rangle \langle jm'' | \hat{J}_{\pm} | jm \rangle - \langle jm' | \hat{J}_{\pm} | jm'' \rangle \langle jm'' | \hat{J}_z | jm \rangle \right\} = \\
&= \hbar (m' - m) \langle jm' | \hat{J}_{\pm} | jm \rangle.
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Для отримання кінцевого результату було використано формулу (4.7).

Порівнюючи цей вираз з матричним елементом від правої частини (4.12), отримаємо

$$(m' - m) \langle jm' | \hat{J}_{\pm} | jm \rangle = \pm \langle jm' | \hat{J}_{\pm} | jm \rangle \tag{4.15}$$

або

$$\begin{aligned}\langle jm' | \hat{J}_+ | jm \rangle &= (J_+)_m \delta_{m,m'+1}, \\ \langle jm' | \hat{J}_- | jm \rangle &= (J_-)_m \delta_{m,m'-1}.\end{aligned}\quad (4.16)$$

Іншими словами, оператор \hat{J}_+ переводить стан $|jm\rangle$ в новий стан з тим самим j , але в якому значення m на одиницю більше. Аналогічно, оператор \hat{J}_- зменшує на одиницю значення m . Тому \hat{J}_+ називають підвищуючим, а \hat{J}_- - понижуючим оператором. Таким чином заключаємо, що m приймає наступні значення

$$\hbar m_1, \hbar(m_1+1), \dots, \hbar(m_2-1), \hbar m_2, \quad (4.17)$$

де m_1 - мінімальне, а m_2 - максимальне значення величини m . Із (4.17) випливає, що різниця $m_2 - m_1$ повинна бути цілим числом. Крім того, щоб число m_1 було скінченне, необхідно вимагати, щоб оператор \hat{J}_- переводив стан $|jm_1\rangle$ в нуль:

$$\hat{J}_- |jm_1\rangle = 0. \quad (4.18)$$

Так само, для того, щоб число m_2 було скінченне, необхідно накласти умову

$$\hat{J}_+ |jm_2\rangle = 0. \quad (4.19)$$

Запишемо оператор \hat{J}^2 через оператори \hat{J}_\pm і \hat{J}_z , і використовуючи (4.13), отримаємо

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 &= \frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z = \\ &= \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z.\end{aligned}\quad (4.20)$$

Обчислимо тепер матричний елемент оператора (4.20) між станами з мінімальним значенням магнітного квантового числа $m = m_1$

$$\begin{aligned}\langle jm_1 | \hat{J}^2 | jm_1 \rangle &= \langle jm_1 | \hat{J}_+\hat{J}_- | jm_1 \rangle + \langle jm_1 | \hat{J}_z^2 | jm_1 \rangle - \\ &- \langle jm_1 | \hbar\hat{J}_z | jm_1 \rangle = \hbar^2 m_1 (m_1 - 1).\end{aligned}\quad (4.21)$$

При знаходженні цієї рівності була використана умова (4.18). З іншої сторони, використовуючи (4.19), отримаємо для матричного елемента цього оператора між станами з максимальним значенням магнітного квантового числа $m = m_2$

$$\begin{aligned} \langle jm_2 | \hat{J}^2 | jm_2 \rangle &= \langle jm_2 | \hat{J}_- \hat{J}_+ | jm_2 \rangle + \langle jm_2 | \hat{J}_z^2 | jm_2 \rangle + \\ &+ \langle jm_2 | \hbar \hat{J}_z | jm_2 \rangle = \hbar^2 m_2 (m_2 + 1). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Однак, враховуючи, що матричні елементи оператора J^2 не залежать від m (див. (4.5)), маємо

$$\frac{1}{\hbar^2} A_j = m_2 (m_2 + 1) = m_1 (m_1 - 1), \quad m_1 \leq m_2. \quad (4.23)$$

Дві умови (4.23) виконуються, якщо $m_1 = -m_2$. Оскільки $m_2 - m_1$ повинно бути цілим, то значення m можуть бути або цілими, або напівцілими, причому

$$A_j = \hbar^2 m_2 (m_2 + 1). \quad (4.24)$$

Надалі m_2 будемо позначати літерою j . В результаті отримаємо

$$A_j = \hbar^2 j(j+1) \quad \text{і} \quad -j \leq m \leq j, \quad (4.25)$$

де j - ціле чи напівціле число.

Таким чином частина задачі розв'язана: знайдені власні значення квадрата моменту кількості руху і його z -проекції. При цьому на основі (4.7) легко знайти, що оператор \hat{J}_z описується діагональною матрицею розмірності $(2j+1) \times (2j+1)$ по діагоналі якої стоять власні значення цього оператора ($\hbar m$)

$$\langle jm' | \hat{J}_z | jm \rangle = \hbar \begin{pmatrix} j & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & j-1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & -j+1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -j \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

Залишилося знайти матриці операторів \hat{J}_x і \hat{J}_y . Для цього достатньо знайти ненульові матричні елементи підвищуючого і понижуючого операторів \hat{J}_\pm .

Перш за все зазначимо, що із ермітовості операторів \hat{J}_x і \hat{J}_y випливає

$$\langle jm' | \hat{J}_+ | jm \rangle = \langle jm | \hat{J}_- | jm' \rangle^*. \quad (4.27)$$

Тоді із (4.6), (4.20) і (4.27) отримаємо

$$\begin{aligned} \langle jm' | \hat{J}_+ \hat{J}_- | jm \rangle &= \sum_{m''} \langle jm' | \hat{J}_+ | jm'' \rangle \langle jm'' | \hat{J}_- | jm \rangle = \\ &= \sum_{m''} \langle jm' | \hat{J}_+ | jm'' \rangle \langle jm | \hat{J}_+ | jm'' \rangle^* = \\ &= \left| \langle jm | \hat{J}_+ | j(m-1) \rangle \right|^2 \delta_{mm'} = \langle jm' | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z | jm \rangle = \\ &= \hbar^2 [j(j+1) - m(m-1)] \delta_{mm'}, \end{aligned}$$

звідки заключаємо, що ненульовими матричними елементами оператора є:

$$\langle j(m+1) | \hat{J}_+ | jm \rangle = e^{i\delta} \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \quad (4.28)$$

Аналогічно одержимо

$$\langle jm | \hat{J}_- | j(m+1) \rangle = e^{-i\delta} \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \quad (4.29)$$

Фаза δ не впливає на фізичну відповідь і надалі її можна покласти рівною нулю.

Із (4.11), (4.28) та (4.29) легко знаходимо, що ненульові матричні елементи операторів \hat{J}_1 і \hat{J}_2 наступні

$$\begin{aligned} \langle j(m+1) | \hat{J}_x | jm \rangle &= \langle jm | \hat{J}_x | j(m+1) \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \\ \langle j(m+1) | \hat{J}_y | jm \rangle &= -\langle jm | \hat{J}_y | j(m+1) \rangle = \\ &= -i \frac{\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Варто при цьому підкреслити, що при виведенні цих формул ніде не було використано явний вигляд операторів моменту, а лише тільки комутаційні співвідношення (4.3).

4.2. Матричні елементи компонент оператора моменту для $j = 1$

На основі (4.30) знаходимо явний вигляд матриць для операторів моменту з $j = 1$:

$$\begin{aligned} \langle 1m' | \hat{J}_x | 1m \rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & \langle 1m' | \hat{J}_y | 1m \rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \\ \langle 1m' | \hat{J}_z | 1m \rangle &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Звідси легко знайти, що матриця оператора квадрата моменту пропорційна одиничній

$$\langle 1m' | \hat{J}^2 | 1m \rangle = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

причому коефіцієнт пропорційності рівний $2\hbar^2$.

На основі результатів попереднього Розділу нормованими власними функціями операторів квадрату моменту кількості руху \hat{J}^2 і його третьої проєкції \hat{J}_z в представленні моменту кількості руху будуть матриці-стовпчики

$$|11\rangle \equiv C_{+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle \equiv C_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1-1\rangle \equiv C_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

4.3. Матричні елементи компонент оператора моменту для $j = 1/2$. Матриці Паулі

В випадку моменту кількості руху $j = 1/2$ (наприклад, спин електрона) для матриць моментів отримуємо

$$\left\langle \frac{1}{2} m' \left| \hat{J} \right| \frac{1}{2} m \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \bar{\sigma}_{m'm}, \quad (4.33)$$

де

$$\bar{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (4.34)$$

представляє собою вектор, елементи якого є матрицями 2×2 . Ці матриці називають *матрицями Паулі*. На основі (4.30) легко знайти їх явний вигляд

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

Таким чином оператор спін $1/2$ виражається через матриці Паулі згідно:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \bar{\sigma}. \quad (4.36)$$

Для матриць Паулі виконуються наступні правила комутації

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \varepsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (4.37)$$

Крім того квадрат кожної з матриць Паулі рівний одиничній матриці

$$\sigma_i^2 = 1. \quad (4.38)$$

При цьому добуток двох матриць Паулі виражається через одиничну матрицю та самі матриці Паулі, тобто матриці Паулі разом з одиничною матрицею утворюють алгебру

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (4.39)$$

Відмітимо, що (4.38) приводить до

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2. \quad (4.40)$$

4.4. Властивості співорів

У випадку $j=1/2$ нормованими власними функціями операторів квадрата моменту кількості руху \hat{J}^2 і його третьої проєкції \hat{J}_3 в представленні моменту кількості руху будуть дворядні матриці-стовпці

$$\chi_+ \equiv C_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- \equiv C_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

В загальному випадку оператор спіну діє в просторі матриць-стовпців

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}, \quad (4.42)$$

де χ^1 і χ^2 – комплексні числа. З умови нормування отримаємо, що

$$\chi^\dagger \chi = |\chi^1|^2 + |\chi^2|^2 = 1. \quad (4.43)$$

При поворотах χ перетворюються по білінійному закону

$$\chi \rightarrow \chi' = \begin{pmatrix} a\chi^1 + b\chi^2 \\ c\chi^1 + d\chi^2 \end{pmatrix}, \quad (4.44)$$

де комплексні числа a , b , c і d утворюють унітарну матрицю 2×2

$$\tilde{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \tilde{U}^\dagger \tilde{U} = 1. \quad (4.45)$$

З умови (4.45) отримуємо

$$\det \tilde{U}^\dagger \det \tilde{U} = |\det \tilde{U}|^2 = 1. \quad (4.46)$$

Це означає, що

$$\det \tilde{U} = e^{i\theta} \quad (4.47)$$

і матрицю \tilde{U} завжди можна представити у вигляді

$$\tilde{U} = U e^{i\frac{\theta}{2}}, \quad \text{де } U^\dagger U = 1 \quad \text{і} \quad \det U = 1, \quad (4.48)$$

тобто U - унімодулярна матриця. Проте перетворення $\chi \rightarrow \chi' = e^{i\frac{\theta}{2}} \chi$ змінює тільки фазу хвильової функції, яка не має фізичного змісту. Тому її варто виключити. Остаточно отримуємо, що дворядна матриця-стовпчик перетворюється під дією 2×2 унімодулярної матриці U

$$\chi \rightarrow \chi' = U \chi. \quad (4.49)$$

Величини, які перетворюються по такому закону, є новими геометричними об'єктами і називаються *спінорами*. Матриці U , за допомогою яких перетворюються спінори при обертанні простору, утворюють групу. Ця група називається групою $SU(2)$.

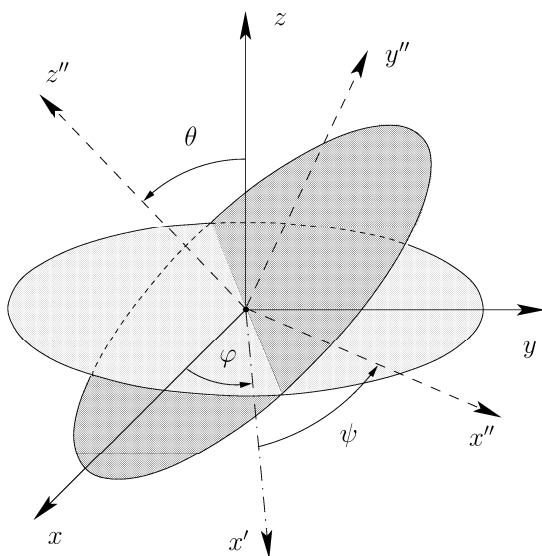


Рис. 14. Кути Ейлера. Спочатку проводиться обертання на кут φ навколо вісі z . Потім поворот на кут θ навколо повернутої осі x' і поворот на кут ψ навколо повернутої осі $z' = z''$.

Легко знайти число незалежних дійсних змінних, від яких залежить матриця U . Набору чотирьох комплексних параметрів a , b , c і d в (4.44) відповідають 8 дійсних чисел. Вимога

унітарності матриці U накладає на них чотири обмеження. Ще одне обмеження випливає з вимоги $\det U = 1$. В результаті отримуємо, що в загальному випадку матриця U залежить від $8-5=3$ дійсних параметрів.

Такими параметрами, для прикладу, можна вибрати три кута Ейлера: φ - кут повороту навколо осі z , θ - навколо повернутої осі x' і ψ - навколо повернутої осі z' (див. Рис. 14). Відповідно шукане перетворення представляє собою три послідовні обертання

$$U(\varphi, \theta, \psi) = U_z(\psi)U_x(\theta)U_z(\varphi). \quad (4.50)$$

Розглянемо спочатку обертання системи координат навколо осі z . В цьому випадку вектор, який в початковій системі координат мав компоненти $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, буде мати такі компоненти в новій системі координат

$$\begin{aligned} \sigma'_x &= \cos \varphi \sigma_x - \sin \varphi \sigma_y, \\ \sigma'_y &= \sin \varphi \sigma_x + \cos \varphi \sigma_y, \\ \sigma'_z &= \sigma_z. \end{aligned} \quad (4.51)$$

З іншої сторони, це перетворення здійснюється за допомогою матриці (4.45)

$$\vec{\sigma}' = U_z \vec{\sigma} U_z^\dagger. \quad (4.52)$$

Використовуючи властивості матриць Паулі, зазначаємо, що для виконання (4.51) матриця U повинна мати наступну структуру

$$U_z = a + ib\sigma_z, \quad \text{причому} \quad a^2 + b^2 = 1. \quad (4.53)$$

Тоді підставляючи (4.53) в (4.52) і порівнюючи з (4.51) отримаємо

$$a^2 - b^2 = \cos \varphi, \quad 2ab = -\sin \varphi, \quad (4.54)$$

звідки

$$a = \cos \frac{\varphi}{2}, \quad b = -\sin \frac{\varphi}{2} \quad (4.55)$$

або

$$U_z(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}\varphi} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix} = \exp\left(-\frac{i}{2}\varphi\sigma_z\right). \quad (4.56)$$

Для того, щоб отримати закон обертання навколо осі x , потрібно повторити всі ці роздуми, замінюючи σ_z на σ_x . Отримаємо

$$U_1(\varphi) = \exp\left(\frac{i}{2}\theta\sigma_1\right). \quad (4.57)$$

В результаті маємо

$$\begin{aligned} U(\varphi, \theta, \psi) &= \\ &= \left(\cos\frac{\psi}{2} + i\sigma_z \sin\frac{\psi}{2}\right) \left(\cos\frac{\theta}{2} + i\sigma_x \sin\frac{\theta}{2}\right) \left(\cos\frac{\varphi}{2} + i\sigma_z \sin\frac{\varphi}{2}\right) = \\ &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} & i \sin\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} \\ i \sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} & \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.58)$$

Якщо тепер розглянути обертання на кут 2π навколо однієї з осей, то ця матриця зведеться до $U(2\pi) = -1$. Отже, спінор при такому повороті змінює знак

$$\varphi \rightarrow \chi' = U(2\pi)\chi = -\chi. \quad (4.59)$$

Відмітимо ще одну властивість спінорів: із компонент двох

спінорів $\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$ і $\tilde{\chi} = \begin{pmatrix} \tilde{\chi}_1 \\ \tilde{\chi}_2 \end{pmatrix}$ можна побудувати скаляр і вектор.

Дійсно, легко побачити, що при перетворенні спінорів (4.58) комбінація

$$S = \chi_1 \tilde{\chi}_2 - \chi_2 \tilde{\chi}_1 \quad (4.60)$$

залишається незмінною, а комбінації

$$V_1 = -\chi_1 \tilde{\chi}_1 + \chi_2 \tilde{\chi}_2, \quad V_2 = i(\chi_1 \tilde{\chi}_1 + \chi_2 \tilde{\chi}_2), \quad V_3 = \chi_1 \tilde{\chi}_2 + \chi_2 \tilde{\chi}_1 \quad (4.61)$$

перетворюються як компоненти вектора

$$\begin{aligned}
V_x &\rightarrow (\cos \psi \cos \varphi - \sin \psi \cos \theta \sin \varphi) V_x + \\
&\quad + (\cos \psi \sin \varphi + \sin \psi \cos \theta \cos \varphi) V_y + \sin \psi \sin \theta V_z, \\
V_y &\rightarrow -(\sin \psi \cos \varphi + \cos \psi \cos \theta \sin \varphi) V_x + \\
&\quad + (-\sin \psi \sin \varphi + \cos \psi \cos \theta \cos \varphi) V_y + \cos \psi \sin \theta V_z, \\
V_z &\rightarrow \sin \theta \sin \varphi V_x - \sin \theta \cos \varphi V_y + \cos \theta V_z.
\end{aligned} \tag{4.62}$$

Задачі

4.1. Знайти власні значення та власні функції операторів \hat{S}_x та \hat{S}_y проєкцій спіну електрона.

4.2. Спростити вираз $\hat{F} = e^{i\vec{a}\vec{\sigma}}$, де \vec{a} звичайний вектор.

4.3. Знайти середні значення операторів проєкції спіну електрона \hat{S}_x , \hat{S}_y та \hat{S}_z по хвильовій функції $\chi = C \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$.

РОЗДІЛ 5. КВАНТОВА ЧАСТИНКА В ЦЕНТРАЛЬНОМУ ПОЛІ

5.1. Радіальне рівняння Шрьодінгера

Запишемо в сферичних координатах (див. Додаток Д) гамільтоніан частинки, що знаходиться в сферично-симетричному полі:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + U(r). \quad (5.1)$$

Тут оператор Лапласа

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Lambda(\theta, \varphi), \quad (5.2)$$

де

$$\Lambda(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = -\frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2, \quad (5.3)$$

і \hat{L} - оператор орбітального моменту.

Таким чином гамільтоніан (5.1) приймає вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2Mr^2} + U(r). \quad (5.4)$$

Вводячи оператор радіального імпульсу $\hat{p}_r \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$ цей вираз

можна переписати у вигляді:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2M} + \frac{\hat{L}^2}{2Mr^2} + U(r), \quad (5.5)$$

яке є очевидним квантовим аналогом класичного виразу для енергії частинки в сферично-симетричному полі. Як і в класичному аналогові перший член в (5.5) представляє частину кінетичної енергії частинки, що пов'язана з її радіальним рухом. Другий член представляє енергію обертання.

Очевидно, що гамільтоніан (5.5) комутує з оператором квадрату моменту кількості руху і його проекціями. Тому будемо

шукати розв'язки, які є власними функціями квадрату моменту кількості руху і його z -проекції. З цією метою в стаціонарному рівнянні Шрьодінгера

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2M} + \frac{\hat{L}^2}{2Mr^2} + U(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (5.6)$$

розділяємо радіальну r і кутові θ, φ змінні

$$\psi(r, \theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)\Phi(r), \quad (5.7)$$

причому покладаємо, що $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ є власною функцією операторів \hat{L}^2 і \hat{L}_z . Власні значення цих операторів рівні, відповідно, $\hbar^2 l(l+1)$ і $\hbar m$, де $l = 0, 1, 2, \dots$ і $-l \leq m \leq l$ (див. Розділ 4). Квантові числа l і m називають *орбітальним і магнітним квантовими числами*.

Функції $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ називають *сферичними функціями*. Вони задовольняють умову нормування:

$$\int d\Omega Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{m'm}, \quad (5.8)$$

де елемент тілесного кута

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (5.9)$$

При невід'ємних m сферичні функції в явному вигляді є

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (5.10)$$

де $P_l^m(\cos \theta)$ - приєднані поліноми Лежандра

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{\sin^m \theta}{2^l l!} \frac{d^{m+l}}{(d \cos \theta)^{m+l}} (\cos^2 \theta - 1)^l, \quad (5.11)$$

причому $m = 0, 1, 2, \dots, l$. При від'ємних m сферичні функції визначаються з умови:

$$Y_{l,-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\theta, \varphi). \quad (5.12)$$

Наведемо декілька сферичних функцій у явному вигляді

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad (5.13)$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}, \quad (5.14)$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right), \quad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}, \quad (5.15)$$

$$Y_{22} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}.$$

Слід відмітити, що при операції інверсії (див. Задачу 1.1) сферичні функції перетворюються згідно

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \rightarrow (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Тому стан з певним значенням орбітального моменту має певне значення парності, $P = (-1)^l$.

Функція $\Phi(r)$ представляє собою розв'язок рівняння

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2M} + \frac{1}{2M} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} + U(r) \right] \Phi(r) = E\Phi(r). \quad (5.16)$$

Вона характеризується значеннями енергії і орбітального квантового числа, $\Phi_{El}(r)$. Зручно ввести нову функцію, яку будемо називати *радіальною хвильовою функцією*, згідно

$$\Phi_{El}(r) = \frac{1}{r} R_{El}(r). \quad (5.17)$$

При цьому рівняння (5.16) приймає вигляд одновимірного рівняння Шрьодінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 R_{El}}{dr^2} + \left[\frac{1}{2M} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} + U(r) \right] R_{El}(r) = ER_{El}(r) \quad (5.18)$$

з новим сферично-симетричним потенціалом

$$U_{\text{эф}}(l, r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}. \quad (5.19)$$

Останній включає кінетичну енергію обертання, і, таким чином, залежить від орбітального квантового числа.

З урахуванням (5.8) радіальна хвильова функція для дискретного спектру нормована умовою

$$\int_0^{\infty} R_{El}^2(r) dr = 1. \quad (5.20)$$

З умови скінченності хвильової функції $\Phi_{El}(r)$ в точці $r = 0$ отримаємо граничну умову:

$$R_{El}(0) = 0. \quad (5.21)$$

Підкреслимо, що ліва частина рівняння (5.18) не залежить від m і, отже, енергія не залежить від магнітного квантового числа. Оскільки кожному значенню орбітального квантового числа l відповідає $2l + 1$ різних значень магнітного квантового числа m , то кожний енергетичний рівень E виявляється виродженим $2l + 1$ разів.

Цей результат очевидний з точки зору симетрії задачі. Оскільки поле сферично-симетричне, то нема виділеного напрямку, а тому енергія не може залежати від проекції моменту кількості руху, тобто магнітного квантового числа m . Якщо сферична симетрія потенціалу буде порушена, то виникне виділений напрям, і енергія частинки почне залежати від m . Для прикладу це можна зробити, помістивши частинку у зовнішнє постійне магнітне поле. Таку задачу буде розглянуто далі у Розділі 7.

На завершення визначимо поведінку хвильової функції при $r \rightarrow 0$. Будемо вважати, що за абсолютним значенням потенціал зростає не швидше, ніж $r^{-2+\varepsilon}$, де ε довільне додатне число. Тоді при $r \rightarrow 0$ в радіальному рівнянні Шрьодінгера залишаються лише члени порядку r^{-2}

$$-\frac{d^2 R_l}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} R_l = 0, \quad (5.22)$$

звідки отримуємо два розв'язки: r^{l+1} і r^{-l} . Для того, щоб задовольнити граничну умову (5.21), потрібно залишити тільки перший з них. Таким чином

$$R_l \propto r^{l+1} \quad \text{при} \quad r \rightarrow 0. \quad (5.23)$$

5.2. Знаходження енергетичних рівнів і хвильових функцій атома водню

Іони, що мають тільки один електрон (He^+ , Li^{++} , Be^{+++} і т.д.) називають *воднеподібними атомами*. Якщо виключити ряд тонких ефектів (наприклад, надтонке розщеплення, тобто взаємодію спінових магнітних моментів електрона і ядра), то їх властивості виявляться дуже подібними. Єдина відмінність полягає в тому, що в цих іонах інтенсивність кулонівського поля, в якому знаходиться єдиний електрон, збільшена порівняно з атомом водню в Z раз, де Z – порядковий номер елемента в таблиці Менделєєва. Тому далі будемо обговорювати тільки атом водню. Спектр і хвильові функції воднеподібних атомів отримаємо простою заміною

$$e^4 \rightarrow Z^2 e^4 \quad (5.24)$$

у відповідних формулах для атома водню. Тут і далі e – елементарний електричний заряд.

Атом водню представляє приклад сферично-симетричної задачі. В цьому випадку рівняння (5.18) для радіальної хвильової функції $R_l(r)$ містить наступний ефективний потенціал (див. Рис. 15)

$$U_{\text{еф}}(l, r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M_e r^2} \quad (5.25)$$

де M_e – маса електрона. Мінімум потенціалу досягається в точці

$$r_{\text{мін}} = a_0 l(l+1) \quad (5.26)$$

і рівний

$$U_{\text{еф}}(l, r_{\text{мін}}) = -\frac{e^2}{2a_0 l(l+1)}, \quad (5.27)$$

де величина

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{M_e e^2} \quad (5.28)$$

має розмірність довжини і називається *радіусом Бора*. Його числове значення рівне $0,528 \text{ \AA}$. Далі покажемо, що радіус Бора – це найбільш ймовірна відстань від електрона до ядра для основного стану атома водню. Радіус Бора являється природнім масштабом в атомній фізиці.

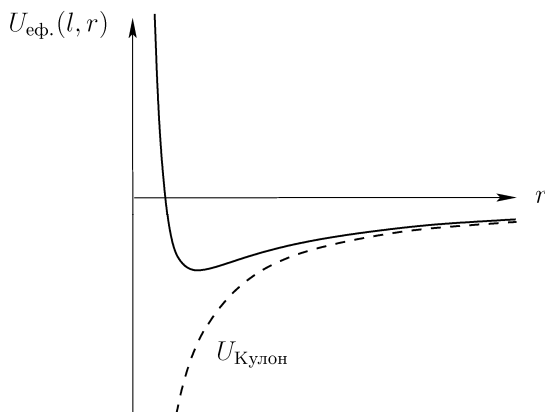


Рис. 15. Ефективний потенціал $U_{\text{еф}}(l, r)$ (суцільна крива) є сумою кулонівського потенціалу (пунктир) і енергії обертання.

З (5.26) відразу видно, що з ростом орбітального моменту точка мінімуму ефективного потенціалу зміщується праворуч і прямує до нескінченності коли $l \rightarrow \infty$.

Тепер з'ясуємо асимптотичну поведінку радіальної хвильової функції $R_l(r)$ при $r \rightarrow \infty$. В цьому випадку можна покласти $U_{\text{еф}} = 0$ і рівняння Шрьодінгера зведеться до

$$-\frac{\hbar^2}{2M_e} \frac{d^2 R_l^{\text{аси}}}{dr^2} = E R_l^{\text{аси}}, \quad (5.29)$$

яке має два розв'язки: $e^{-\alpha r}$ і $e^{\alpha r}$, де

$$\alpha = \sqrt{-\frac{2M_e E}{\hbar^2}} \quad (5.30)$$

і тому загальний розв'язок має вигляд

$$R_l^{\text{аси}} = Ae^{-\alpha r} + Be^{\alpha r} \quad (5.31)$$

Вімітимо, що енергія електрона у зв'язаному стані є від'ємною і тому α дійсне і додатне.

Для того, щоб отримати розв'язок, що спадає на нескінченності, необхідно покласти $B = 0$,

$$R_l^{\text{аси}} = Ae^{-\alpha r} \quad \text{при } r \rightarrow \infty. \quad (5.32)$$

Враховуючи (5.22) і (5.32) будемо шукати розв'язок рівняння Шрьодінгера для радіальної частини хвильової функції $R_l(r)$ у вигляді

$$R_l(r) = r^{l+1} \sum_{v=0}^{\infty} \beta_v r^v \exp(-\alpha r). \quad (5.33)$$

Підставляючи (5.33) в радіальне рівняння Шрьодінгера (5.18) і прирівнюючи в правій і лівій частинах коефіцієнти при однакових степенях r отримаємо рекурентні співвідношення між коефіцієнтами

$$\beta_{v+1} = \frac{2[a_0^{-1} - \alpha(l+v+1)]}{l(l+1) - (l+v+1)(l+v+2)} \beta_v. \quad (5.34)$$

Для того, щоб хвильова функція прямувала до нуля на нескінченності, потрібно щоб ряд (5.33) обривався при деякому $v = n_r$. Це приводить до вимоги

$$\alpha = \alpha_n = \frac{1}{a_0 n}, \quad (5.35)$$

де $n = n_r + l + 1$. Ця умова приводить до квантування енергії

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2M_e a_0^2 n^2}. \quad (5.36)$$

Квантове число n називають *головним квантовим числом*, а n_r - *радіальним квантовим числом*. Таким чином, значення енергії

електрона в стаціонарних станах атома водню залежить тільки від головного квантового числа n . При цьому можливі значення орбітального квантового числа обмежені нерівністю $n_r \geq 0$, або

$$l \leq n - 1. \quad (5.37)$$

Отже, кожний рівень (крім основного стану E_1) буде виродженим, як по магнітному m , так і по орбітальному l квантовим числам.

Кратність виродження рівня, що відповідає значенню головного квантового числа n , дорівнює

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (5.38)$$

В спектроскопії прийняті наступні позначення для квантових станів з певним значенням орбітального моменту: стан з $l = 0$ називають s -станом, з $l = 1$ – p -станом, з $l = 2$ – d -станом, з $l = 3$ – f -станом. Далі стани йдуть в порядку латинського алфавіту. При цьому головне квантове число ставлять зліва від значка, що позначає орбітальний момент стану. Таким чином

$$nl \quad (5.39)$$

представляє стан з орбітальним квантовим числом l і головним квантовим числом n . Наприклад, $1s$ означає стан з $n = 1$ і $l = 0$, $2p$ – з $n = 2$ і $l = 1$ і т.д. Найнижчі стани для електрона в атомі водню приведені на Рис. 16, де також показані переходи, дозволені правилами відбору дипольних переходів $\Delta l = \pm 1$, які ми обговоримо дещо пізніше.

Враховуючи те, що спин електрона рівний $\frac{\hbar}{2}$, для повного опису стану варто додати ще квантове число, що характеризує повний момент кількості руху електрона, j , яке приймає одне з двох значень $l + \frac{1}{2}$, $l - \frac{1}{2}$ (якщо $l \neq 0$) або $1/2$ (якщо $l = 0$). j пишеться справа знизу від орбітального квантового числа

$$nl_j. \quad (5.40)$$

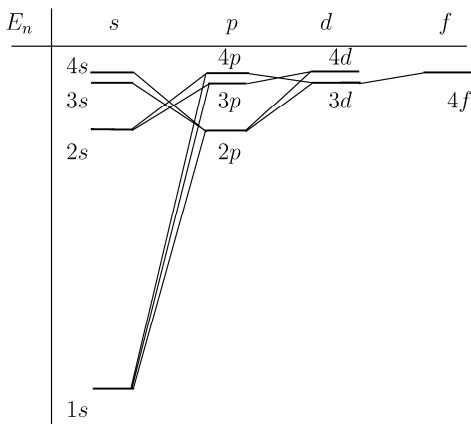


Рис. 16. Спектр атома водню. Тонкими лініями показано переходи дозволіні правилами відбору дипольних переходів (див. Розділ 8).

В результаті отримуємо наступний набір найнижчих станів атома водню

$$1s_{\frac{1}{2}},$$

$$2s_{\frac{1}{2}}, 2p_{\frac{1}{2}}, 2p_{\frac{3}{2}},$$

$$3s_{\frac{1}{2}}, 3p_{\frac{1}{2}}, 3p_{\frac{3}{2}}, 3d_{\frac{3}{2}}, 3d_{\frac{5}{2}},$$

$$4s_{\frac{1}{2}}, 4p_{\frac{1}{2}}, 4p_{\frac{3}{2}}, 4d_{\frac{3}{2}}, 4d_{\frac{5}{2}}, 4f_{\frac{5}{2}}, 4f_{\frac{7}{2}}.$$

Приведемо радіальні хвильові функції для найнижчих енергетичних станів водню

$$R_{1s} = \frac{2}{\sqrt{a_0}} \rho e^{-\rho},$$

$$R_{2s} = \frac{\rho}{\sqrt{2a_0}} \left(1 - \frac{1}{2}\rho\right) e^{-\frac{1}{2}\rho}, \quad R_{2p} = \frac{\rho^2}{2\sqrt{6a_0}} e^{-\frac{1}{2}\rho}, \quad (5.41)$$

$$R_{3s} = \frac{2\rho}{3\sqrt{3a_0}} \left(1 - \frac{2}{3}\rho + \frac{2}{27}\rho^2\right) e^{-\frac{1}{3}\rho},$$

$$R_{3p} = \frac{8\rho^2}{27\sqrt{6}a_0} \left(1 - \frac{1}{6}\rho\right) e^{-\frac{1}{3}\rho}, \quad R_{3d} = \frac{4\rho^3}{81\sqrt{30}a_0} e^{-\frac{1}{3}\rho},$$

де введено безрозмірну змінну $\rho = \frac{r}{a_0}$. Умова нормування цих хвильових функцій дається формулою (5.20).

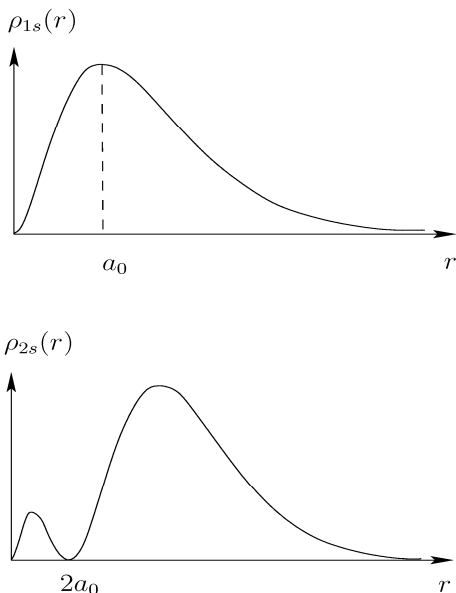


Рис. 17. Густина ймовірності електрона в стані $1s$ (верхній рисунок) і $2s$ (нижній рисунок) атома водню. Для $1s$ стану максимум ймовірності досягається на відстані від ядра, рівній радіусу першої борівської орбіти. Для $2s$ вона дорівнює нулю при відстані від ядра рівній подвоєному радіусу першої борівської орбіти.

5.3. Густина розподілу електронної “хмари” в атомі водню

Тепер можна розрахувати розподіл густини ймовірності знайти електрон в атомі водню в певному стані. Почнемо з основного стану $1s$.

Ймовірність виявити електрон в $1s$ стані в елементі тілесного кута $d\Omega$ в шарі від r до $r + dr$ буде

$$\rho_{1s}(r, \theta, \varphi) dr d\Omega = |\psi_{1s}(r, \theta, \varphi)|^2 dr d\Omega = \quad (5.42)$$

$$= \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 \exp \left(-\frac{2r}{a_0} \right) dr d\Omega.$$

Таким чином густина є сферично-симетричною (див. верхній графік на Рис. 17). Максимум кривої відповідає радіусу борівської орбіти $r_{\text{мак}} = a_0$.

Тепер розглянемо стани з головним квантовим числом $n = 2$. Відповідні хвильові функції є:

$$\psi_{2s}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) \exp \left(-\frac{r}{2a_0} \right), \quad (5.43)$$

$$\psi_{2p}^{m=0}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} \exp \left(-\frac{r}{2a_0} \right) \cos \theta, \quad (5.44)$$

$$\psi_{2p}^{m=\pm 1}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} \exp \left(-\frac{r}{2a_0} \right) \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \quad (5.45)$$

Бачимо, що $2s$ хвильова функція має один вузол при $r = 2a_0$. Отже, густина ρ_{2s} сферично-симетрична і дорівнює нулю в цій точці (нижній графік на Рис. 17).

В $2p$ станах густина від кута φ не залежить. На основі формул для сферичних функцій заключаємо, що ця залежність пропадає і для густин всіх інших станів. В результаті ці густини будуть симетричні відносно осі z . Проте залежність від полярного кута θ залишається. Причому вона така, що для стану з магнітним квантовим числом $m = 0$ густина дорівнює нулю на площині $x - y$, а для стану з $m = \pm 1$ вона дорівнює нулю вздовж осі z .

Можна показати в загальному випадку, що для станів nl хвильова функція буде сферично-симетричною і матиме $n - l$ вузлів.

5.4. Хвильові функції неперервного спектра для електрона в кулонівському полі

Обговоримо тепер стани неперервного спектру електрона, який знаходиться в кулонівському полі $-\frac{Ze^2}{r}$. В цьому випадку енергія електрона додатна, $E > 0$, і параметр α в (5.28) стає уявним

$$\alpha = \pm i \sqrt{\frac{2M_e E}{\hbar^2}} \equiv \pm ik.$$

Тому асимптотична поведінка радіальної хвильової функції

$$R_l(r) = A e^{ikr} + B e^{-ikr} \quad \text{при } r \rightarrow \infty$$

відповідає осцилюючій функції. При $r \rightarrow 0$ поведінка хвильової функції залишається попередньою (5.20). Тому розв'язок радіального рівняння варто шукати у вигляді

$$R_l(r) = e^{\pm ikr} r^{l+1} \sum_{\nu=0}^{\infty} \beta_{\nu} r^{\nu}. \quad (5.46)$$

Підставляючи цей вираз в рівняння для радіальної хвильової функції, отримаємо рекурентні співвідношення на коефіцієнти

$$\beta_{\nu+1} = \frac{2[Za_0^{-1} \pm ik(l+\nu+1)]}{l(l+1) - (l+\nu+1)(l+\nu+2)} \beta_{\nu}. \quad (5.47)$$

Легко побачити, що $\beta_{\nu+1} \approx \mp \frac{ik}{l+\nu+2} \beta_{\nu}$ при $\nu \rightarrow \infty$. Це означає, що ряд (5.46) завжди збігається. При цьому він виражається через гіпергеометричну функцію

$$R_l(r) = e^{\pm ikr} r \rho^l F\left(l+1 \pm \frac{Z}{ika_0}, 2(l+1), \mp 2ikr\right).$$

Задачі

5.1. Вивести рекурентне співвідношення (5.34).

5.2. Валентний електрон у атомі літія знаходиться у потенціалі, який екранований двома електронами з першої

повністю заповненої оболонки. Цей потенціал можна апроксимувати таким виразом

$$U(r) = -\frac{e^2}{r} - \frac{e^2 d}{r^2},$$

де d параметр розмірності довжини. Знайти енергетичні рівні валентного електрона та відповідні хвильові функції. Звернути увагу на розщеплення енергетичних рівнів по орбітальному моменту.

5.3. Розглянути стаціонарне рівняння Шрьодінгера для потенціалу тривимірного гармонічного осцилятора

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \frac{\kappa}{2} \bar{x}^2 \right) \psi(\bar{x}) = E \psi(\bar{x}).$$

Знайти енергетичний спектр, відповідні хвильові функції та парність станів. Розв'язати задачу у декартових координатах. Звернути увагу на відмінності заповнення виродженого рівня від того, як заповнюється вироджений рівень у атомі водню. Визначити ступень виродженості довільного енергетичного рівня.

5.4. Атом водню знаходиться в основному стані. Знайти потенціал, який створює атом на відстанях $r \ll a_0$ та $r \gg a_0$, де a_0 - борівський радіус.

РОЗДІЛ 6. НАБЛИЖЕНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯННЯ СТАЦІОНАРНОГО РІВНЯННЯ ШРЬОДІНГЕРА

В більшості випадків рівняння Шр'єдінгера не може бути розв'язане точно. Тому доводиться використовувати наближені методи. Один з них, метод ВКБ, вже було розглянуто раніше. Зараз обговоримо ряд інших методів, які дозволяють ефективно вирішувати багато задач квантової механіки.

6.1. Теорія збурень.

Випадок дискретного спектра без виродження

Нехай гамільтоніан системи розбивається на дві частини

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (6.1)$$

причому вважається, що усі розв'язки рівняння Шр'єдінгера для гамільтоніана \hat{H}_0 відомі. Задача полягає в тому, щоб знайти наближені розв'язки рівняння Шр'єдінгера для повного гамільтоніана (6.1).

Будемо вважати, що гамільтоніан \hat{H}_1 приводить до незначних змін розв'язків рівняння Шр'єдінгера для повного гамільтоніана (6.1) і тому його можна вважати "малою добавкою". В цьому випадку \hat{H}_1 називають *збуренням*. Пізніше дамо більш точний критерій використання методу, що розвивається, як і самого поняття, що вважати малою добавкою до гамільтоніана.

Зараз розглянемо найбільш простий випадок, коли спектр розв'язків рівняння

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (6.2)$$

дискретний і не вироджений. Для того, щоб розв'язати рівняння

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_1) |\psi_m\rangle = E_m |\psi_m\rangle, \quad (6.3)$$

розкладемо вектор стану за власними станами незбуреного гамільтоніана

$$|\psi_m\rangle = \sum_n C_{mn} |\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (6.4)$$

При цьому рівняння (6.3) зводиться до

$$\begin{aligned} \sum_n C_{mn} (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) |\psi_n^{(0)}\rangle &= \sum_n C_{mn} (E_n^{(0)} + \hat{H}_1) |\psi_n^{(0)}\rangle = \\ &= E_m \sum_n C_{mn} |\psi_n^{(0)}\rangle. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Помноживши цю рівність зліва на бра-вектор $\langle \psi_k^{(0)} |$ отримаємо нескінченну систему лінійних алгебраїчних рівнянь для коефіцієнтів C_{mn}

$$(E_m - E_k^{(0)}) C_{mk} = \sum_n C_{mn} V_{kn}, \quad \text{де} \quad V_{kn} = \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle. \quad (6.6)$$

Припустимо, що матричні елементи V_{kn} мають порядок малості λ , тобто, що вони можуть бути представлені як

$$V_{kn} = \lambda W_{kn}, \quad (6.7)$$

де W_{kn} скінченне, а $\lambda \ll 1$. Змінюючи параметр λ ми можемо або взагалі “вимкнути” збурення, або зробити його як завгодно малим.

Розкладемо енергію E_m і коефіцієнти C_{mn} в ряд по λ

$$\begin{aligned} E_m &= E_m^{(0)} + E_m^{(1)} + E_m^{(2)} + \dots = E_m^{(0)} + \lambda \varepsilon_m^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_m^{(2)} + \dots \\ C_{mn} &= \delta_{mn} + C_{mn}^{(1)} + C_{mn}^{(2)} + \dots = \delta_{mn} + \lambda c_{mn}^{(1)} + \lambda^2 c_{mn}^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (6.8)$$

Підставляючи (6.8) в (6.6), отримаємо:

$$\begin{aligned} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + \lambda \varepsilon_m^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_m^{(2)} + \dots) (\delta_{mk} + \lambda c_{mk}^{(1)} + \lambda^2 c_{mk}^{(2)} + \dots) = \\ = \lambda \sum_n (\delta_{mn} + \lambda c_{mn}^{(1)} + \dots) W_{kn}. \end{aligned} \quad (6.9)$$

В нульовому порядку по λ рівняння виконується тотожно

$$(E_m^{(0)} - E_k^{(0)}) \delta_{mk} = 0. \quad (6.10)$$

Далі отримуємо в першому порядку по λ

$$(E_m^{(0)} - E_k^{(0)}) c_{mk}^{(1)} + \varepsilon_m^{(1)} \delta_{mk} = W_{km}. \quad (6.11)$$

Відмітимо, що поправка до енергії $E_m^{(1)}$ входить в діагональні елементи ($k = m$), а поправка до хвильової функції $c_{mk}^{(1)}$ - тільки в недиагональні ($m \neq k$). При цьому $c_{mm}^{(1)}$ виявляються невизначеними:

$$\varepsilon_m^{(1)} = W_{mm}, \quad c_{mk}^{(1)} = \begin{cases} \frac{W_{km}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} & \text{при } m \neq k \\ c_{mm}^{(1)} & \text{- невизначено.} \end{cases} \quad (6.12)$$

Таким чином, в першому порядку теорії збурень поправка до m -того рівня енергії рівна середньому значенню оператора збурення по незбуреному вектору стану $|\psi_m^{(0)}\rangle$

$$E_m^{(1)} = V_{mm}, \quad (6.13)$$

а поправка до вектора стану ε :

$$|\psi_m^{(1)}\rangle = \lambda c_{mm}^{(1)} |\psi_m^{(0)}\rangle + \sum_{n \neq m} \frac{V_{nm}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} |\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (6.14)$$

Коефіцієнт $c_{mm}^{(1)}$ визначається з нормування хвильової функції.

При цьому з точністю до членів порядку $O\left(\frac{1}{\lambda^2}\right)$ маємо, що

$c_{mm}^{(1)} = -(c_{mm}^{(1)})^*$. Вибираючи фазовий множник так, щоб хвильові функції були дійсні, отримуємо $c_{mm}^{(1)} = 0$.

Тепер розглянемо розв'язок у другому порядку по λ^2 . З (6.9) маємо:

$$(E_m^{(0)} - E_k^{(0)}) c_{mk}^{(2)} + \varepsilon_m^{(1)} c_{mk}^{(1)} + \varepsilon_m^{(2)} \delta_{mk} = \sum_n W_{kn} c_{mn}^{(1)}. \quad (6.15)$$

Знову розглянемо діагональні елементи

$$\varepsilon_m^{(2)} = \sum_{n \neq m} W_{mn} c_{mn}^{(1)} = \sum_{n \neq m} \frac{|W_{mn}|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (6.16)$$

(тут було використано ермітовість матриці W_{mn}) і поправка до енергії порядку λ^2 рівна

$$E_m^{(2)} = \sum_{n \neq m} \frac{|V_{mn}|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (6.17)$$

Відмітимо, що для основного стану знаменник в (6.17) завжди негативний і тому поправка другого порядку для до енергії цього стану теж завжди негативна.

Недіагональні елементи рівняння (6.15) дають поправки до хвильових функцій порядку λ^2 . Їх потрібно знати для розрахунку поправок до енергії в наступному порядку.

З (6.14) випливає, що для того, щоб теорія збурень, яка використовується для рівня m , була справедлива, необхідно вважати, що

$$\left| \frac{V_{mn}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \right| \ll 1. \quad (6.18)$$

В зв'язку з цим m -й рівень не може бути вироджений, бо інакше знаменник може перетворитися на нуль. Однак наведені вище формули можна використовувати, якщо частина інших рівнів буде вироджена. Більш того, ці формули будуть справедливі, якщо частину рівнів з $n \neq m$ буде відноситись до неперервного спектру. В цьому випадку сумування потрібно замінити на інтегрування.

6.2. Теорія збурень для двох або більше близьких рівнів

Перед тим, як перейти до розгляду загального випадку теорії збурень при наявності виродження, розглянемо один важливий для багатьох практичних задач приклад використання теорії збурень, коли для двох рівнів (скажемо, $E_n^{(0)}$ і $E_m^{(0)}$) не виконується умова (6.18). В цьому випадку вже в нульовому наближенні відповідні вектори стану потрібно шукати в вигляді суперпозиції станів $|\psi_m^{(0)}\rangle$ і $|\psi_n^{(0)}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \alpha |\psi_n^{(0)}\rangle + \beta |\psi_m^{(0)}\rangle, \quad (6.19)$$

при умові, що

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (6.20)$$

Остання забезпечує нормування хвильової функції (6.19).

Підставляючи (6.19) в рівняння Шрьодінгера, отримаємо:

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{H}_1 \right) \left(\alpha |\psi_n^{(0)}\rangle + \beta |\psi_m^{(0)}\rangle \right) = E \left(\alpha |\psi_n^{(0)}\rangle + \beta |\psi_m^{(0)}\rangle \right). \quad (6.21)$$

Помноживши це рівняння зліва на $\langle \psi_m^{(0)} |$ і $\langle \psi_n^{(0)} |$ отримаємо систему двох алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} (H_{nn} - E) \alpha + H_{nm} \beta = 0, \\ H_{mn} \alpha + (H_{mm} - E) \beta = 0, \end{cases} \quad (6.22)$$

де використано таке позначення

$$H_{ik} \equiv \langle \psi_i^{(0)} | \hat{H}_0 + \hat{H}_1 | \psi_k^{(0)} \rangle. \quad (6.23)$$

Знаходячи α з другого рівняння

$$\alpha = \frac{E - H_{mm}}{H_{mn}} \beta \quad (6.24)$$

і підставляючи її в перше, знайдемо рівняння для енергії:

$$E^2 - E(H_{mm} + H_{nn}) + H_{mm}H_{nn} - |H_{nm}|^2 = 0. \quad (6.25)$$

Розв'язуючи це квадратне рівняння, отримаємо два рівня енергії

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left(H_{mm} + H_{nn} \pm \sqrt{(H_{mm} - H_{nn})^2 + 4|H_{nm}|^2} \right). \quad (6.26)$$

Відмітимо, що недіагональні матричні елементи є просто матричними елементами від збурення:

$$H_{mn} = \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle = V_{mn}. \quad (6.27)$$

Розглянемо випадок, коли

$$|H_{mn}| \ll |H_{mm} - H_{nn}|. \quad (6.28)$$

Очевидно, що ця умова еквівалентна умові (6.18). Розкладаючи корінь в ряд, отримаємо результати попереднього розділу. В іншому граничному випадку

$$|H_{mn}| \ll |H_{mm} - H_{nn}| \quad (6.29)$$

розв'язки (6.26) зводяться до

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} (H_{mm} + H_{nn}) \pm \left\{ |H_{nm}| + \frac{(H_{mm} - H_{nn})^2}{8|H_{nm}|} \right\}. \quad (6.30)$$

Далі слід знайти коефіцієнти α і β . Легко бачити, що внаслідок умови (6.20) ці коефіцієнти можна розглядати як синус і косинус деякого кута:

$$\alpha = \sin \varphi, \quad \beta = \cos \varphi. \quad (6.31)$$

Тоді на основі (6.24) пишемо

$$\operatorname{tg} \varphi_{1,2} = \frac{E_{1,2} - H_{mm}}{H_{nm}}. \quad (6.32)$$

Підставляючи сюди значення E_1 і E_2 знаходимо після нескладних перетворень

$$\varphi_1 = \varphi = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{2H_{nm}}{H_{nn} - H_{mm}}, \quad \varphi_2 = \varphi + \frac{\pi}{2} \quad (6.33)$$

та

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle = \cos \varphi |\psi_m^{(0)}\rangle + \sin \varphi |\psi_n^{(0)}\rangle, \\ |\psi_2\rangle = -\sin \varphi |\psi_m^{(0)}\rangle + \cos \varphi |\psi_n^{(0)}\rangle. \end{cases} \quad (6.34)$$

Очевидно, що ці результати залишаються справедливими і у випадку, коли $E_m^{(0)} = E_n^{(0)}$.

Щоб будувати далі теорію збурень, слід зробити такі заміни

$$\begin{aligned} E_n^{(0)} &\rightarrow E_1, & E_m^{(0)} &\rightarrow E_2, \\ |\psi_n^{(0)}\rangle &\rightarrow |\psi_1\rangle, & |\psi_m^{(0)}\rangle &\rightarrow |\psi_2\rangle \end{aligned} \quad (6.35)$$

і проводити подальші розрахунки за старою схемою.

Тепер легко розглянути загальний випадок, коли один рівень (наприклад, $E_n^{(0)}$) має r -кратне виродження. Позначаючи відповідні вектори стану $|\psi_{nq}^{(0)}\rangle$ ($q = 1, 2, \dots, r$) будемо виходити з

$$|\psi_n\rangle = \sum_{q=1}^r C_q |\psi_{nq}^{(0)}\rangle, \quad (6.36)$$

причому

$$\sum_{q=1}^r |C_q|^2 = 1. \quad (6.37)$$

Підставляючи цей вираз в рівняння Шрьодінгера, отримаємо систему рівнянь на коефіцієнти

$$\sum_{p=1}^r H_{qp} C_p - E C_q = 0. \quad (6.38)$$

Умова розв'язності цієї системи

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & \dots & H_{1r} \\ H_{21} & H_{22} - E & \dots & H_{2r} \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ H_{r1} & H_{r2} & \dots & H_{rr} - E \end{vmatrix} = 0 \quad (6.39)$$

дає r розв'язків для енергії E . Це рівняння називають *секулярним* або *віковим* рівнянням. Відповідно маємо r взаємно ортогональних хвильових функцій. Якщо всі розв'язки дають різні енергії, то має місце повного зняття виродження. Якщо частина значень енергії співпадають, то виродження знімається частково.

6.3. Адіабатична теорія збурень

В ряді задач систему взаємодіючих частинок можна так розділити на дві підсистеми, що в одну з них будуть входити ті частинки, координати яких змінюються значно повільніше, ніж координати частинок з другої підсистеми. Тоді невеликі зміни координат частинок другого ґатунку дуже мало впливають на рух частинок першого ґатунку. І навпаки, малі зміни координат частинок першого ґатунку приводять до значних змін координат частинок другого ґатунку.

Характерними прикладами можуть бути тверде тіло або молекула. Ці дві системи представлять собою сукупність двох типів частинок – ядер і електронів, маси яких відрізняються в декілька тисяч разів і більше. В результаті ядра можна вважати майже нерухомими частинками, в електричному полі яких рухаються швидкі електрони. Таким чином ядра відносяться до частинок першого ґатунку, а електрони – другого.

Якщо розділення на частинки першого та другого ґатунку можливе, то квантово-механічна задача може бути розв'язана за допомогою спеціального метода теорії збурень, який називають *адіабатичною теорією збурень*. При цьому в нульовому наближенні вважають частинки першого ґатунку нерухомими, а кінетичну енергію їх руху розглядають як збурення.

Розглянемо систему, що складається з частинок мас M і m ($M \gg m$), які взаємодіють через потенціал $U(\vec{X}, \vec{x})$. Відповідний гамільтоніан є

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}_i^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}_j^2} + U(\vec{X}, \vec{x}), \quad (6.40)$$

де \vec{X}_i і \vec{x}_j - координати частинок I та II гатунку. Зазначимо, що тут і далі значками без індекса \vec{X} і \vec{x} позначено набори відповідних координат:

$$\vec{X} \equiv \{\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{X}_N\}, \quad \vec{x} \equiv \{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n\}. \quad (6.41)$$

При цьому кінетична енергія частинок першого гатунку

$$\hat{T}_1 = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}_i^2} \quad (6.42)$$

може розглядатися як збурення

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{T}_1,$$

$$\hat{H}_0 = \hat{T}_{II} + U(\vec{X}, \vec{x}), \quad \hat{T}_{II} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}_j^2}. \quad (6.43)$$

Нульове наближення відповідає випадку, коли $M \rightarrow \infty$, а координати \vec{X} закріплені. Відповідне рівняння Шрьодінгера

$$\hat{H}_0 \varphi_k(\vec{X}, \vec{x}) = \varepsilon_k(\vec{X}) \varphi_k(\vec{X}, \vec{x}) \quad (6.44)$$

визначає енергію $\varepsilon_k(\vec{X})$ і хвильові функції $\varphi_k(\vec{X}, \vec{x})$ легких частинок, як функції, що залежать від набору зовнішніх параметрів \vec{X} . Якщо рівняння (6.44) розв'язане, то загальну задачу

$$\hat{H} \psi(\vec{X}, \vec{x}) = E \psi(\vec{X}, \vec{x}) \quad (6.45)$$

можна розв'язувати за теорією збурень, покладаючи, що

$$\psi(\vec{X}, \vec{x}) = \sum_k C_k(\vec{X}) \varphi_k(\vec{X}, \vec{x}). \quad (6.46)$$

Тоді (6.45) зведеться до

$$\left[\varepsilon_k(\vec{X}) + \hat{T}_I - E \right] C_k(\vec{X}) = \sum_{k'} \Lambda_{kk'} C_{k'}(\vec{X}), \quad (6.47)$$

де

$$\Lambda_{kk'} = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \int dx \left[2\varphi_k^* \frac{\partial \varphi_{k'}}{\partial \vec{X}_i} \frac{\partial}{\partial \vec{X}_i} + \varphi_k^* \frac{\partial^2 \varphi_{k'}}{\partial \vec{X}_i^2} \right] \quad (6.48)$$

(тут введено позначення $dx \equiv \prod_{j=1}^n d^3x_j$). Оператор $\Lambda_{kk'}$ називають оператором неадіабатичності.

Відомо, що в багатьох задачах оператор неадіабатичності малий і ним можна знехтувати. Зокрема, грубі оцінки показують, що його вклад пропорційний відношенню частот коливань Ω_i в підсистемі I до частот $\omega \sim \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_k}{\hbar}$ коливань частинок в підсистемі II. Характерним прикладом таких коливань можуть бути електронні та коливні моди збудження в молекулах. Останні набагато менші за попередні, і адіабатичне наближення виявляється виправданим.

Нехтуючи оператором неадіабатичності (6.47) зводиться до рівняння Шрьодінгера:

$$\left[\hat{T}_I + \varepsilon_k(\vec{X}) \right] C_{kv}^0(\vec{X}) = E_{kv}^0 C_{kv}^0(\vec{X}), \quad (6.49)$$

де $\varepsilon_k(\vec{X})$ грає роль потенціалу, а $C_{kv}^0(\vec{X})$ має сенс хвильової функції руху частинок гатунку I. Іншими словами, рівняння Шрьодінгера розпадається на систему двох зв'язаних рівнянь (6.44) і (6.49), причому кожному стану k підсистеми швидких частинок відповідають різні квантові стани v підсистеми повільних частинок. Так в випадку молекули відомо, що на кожний рівень електронного спектру накладається коливально-обертальний спектр збуджень.

З метою розв'язку отриманого рівняння (6.49) для повної енергії E_{kv}^0 знайдемо спочатку рівноважну конфігурацію підсистеми I при заданому квантовому стані k підсистеми II.

Нехай вона досягається при деяких значеннях координат $\vec{X} = \vec{X}^{(k)}$ і відповідає енергії $\varepsilon_k(\vec{X}^{(k)})$

$$\frac{\partial \varepsilon_k(\vec{X})}{\partial \vec{X}} = 0, \quad \text{при} \quad \vec{X} = \vec{X}^{(k)}. \quad (6.50)$$

Розкладаючи $\varepsilon_k(\vec{X})$ в ряд в області \vec{X} близькій до $\vec{X}^{(k)}$, зберігаючи члени до другого порядку і переходячи до нормальних координат ξ_{kn} , отримаємо

$$\varepsilon_k(\vec{X}) \approx \varepsilon_k(\vec{X}^{(k)}) + \frac{M}{2} \sum_n \Omega_{kn}^2 \xi_{kn}^2. \quad (6.51)$$

Тоді гамільтоніан, що відповідає рівнянню Шрьодінгера (6.49) буде

$$\hat{H}_k^0 = \sum_n \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \xi_{kn}^2} + \frac{M}{2} \Omega_{kn}^2 \xi_{kn}^2 + \varepsilon_k(\vec{X}^{(k)}) \right]. \quad (6.52)$$

Він являє собою набір осциляторів з частотами Ω_{kn} . Його власні функції характеризуються набором цілих чисел $\nu = \{\nu_1, \nu_2, \dots\}$ для кожної з нормальних мод. Відповідна енергія рівна

$$E_{kv}^0 = \varepsilon_k(\vec{X}) + \hbar \sum_n \Omega_{kn} \left(\nu_n + \frac{1}{2} \right). \quad (6.53)$$

6.4. Варіаційний метод Рітца

В багатьох задачах буває дуже корисний *варіаційний метод Рітца*. Для основного стану він базується на наступній теоремі:

Середнє значення від оператора Гамільтона \hat{H} по будь-яким функціям $\psi(\vec{x})$, нормованим на одиницю, більше або рівне енергії основного стану. Причому, рівність виконується коли $\psi(\vec{x})$ співпадає з хвильовою функцією основного стану.

Для доведення перейдемо до енергетичного представлення. При цьому довільна функція може бути представлена у вигляді:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_n a_n \psi_n(\vec{x}), \quad (6.54)$$

де $\psi_n(\vec{x})$ – власні функції оператора \hat{H} з власними значеннями E_n . З умови нормування функції $\psi(\vec{x})$ на одиницю отримаємо

$$\int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 = \sum_n |a_n|^2 = 1. \quad (6.55)$$

Обчислимо середнє значення енергії:

$$\begin{aligned} \int d^3x \psi^*(\vec{x}) \hat{H} \psi(\vec{x}) &= \sum_n \sum_m a_n^* a_m \int d^3x \psi_n^*(\vec{x}) \hat{H} \psi_m(\vec{x}) = \\ &= \sum_n \sum_m a_n^* a_m \int d^3x \psi_n^*(\vec{x}) E_m \psi_m(\vec{x}) = \\ &= \sum_n |a_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |a_n|^2 = E_0. \end{aligned} \quad (6.56)$$

Очевидно, що для того, щоб ця нерівність перетворилась на рівність потрібно покласти коефіцієнт $a_0 = 1$, а всі останні коефіцієнти покласти рівними нулю. Тим самим хвильова функція $\psi(\vec{x})$ співпадає з функцією основного стану.

Для практичних цілей використовуємо наступну процедуру. Беремо довільну функцію $\psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n; \vec{x})$, де $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ – деякі параметри. При цьому вимагається, щоб функція була нормованою

$$\int d^3x |\psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n; \vec{x})|^2 = 1. \quad (6.57)$$

Така функція $\psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n; \vec{x})$ називається *пробною функцією*.

Потім обчислюється функціонал

$$R_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = \int d^3x \psi^*(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n; \vec{x}) \hat{H} \psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n; \vec{x}) \quad (6.58)$$

і шукається його мінімум за параметрами $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, тобто такі значення параметрів $\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2, \dots, \tilde{\alpha}_n$, щоб виконувалась умова

$$\frac{\partial R_0}{\partial \tilde{\alpha}_1} = 0, \quad \frac{\partial R_0}{\partial \tilde{\alpha}_2} = 0, \quad \dots, \quad \frac{\partial R_0}{\partial \tilde{\alpha}_n} = 0. \quad (6.59)$$

Тоді покладаємо

$$E_0 \approx R_0(\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2, \dots, \tilde{\alpha}_n) \text{ і } \psi_0(\bar{x}) \approx \psi(\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2, \dots, \tilde{\alpha}_n; \bar{x}). \quad (6.60)$$

Звичайно, цей метод дає гарний результат, якщо вдасться завдяки якимось здогадкам вибрати пробну функцію, яка найбільш адекватна поставленій задачі. Часто буває навіть досить використовувати однопараметричну пробну функцію.

Для того, щоб знайти енергію для першого збудженого стану методом Рітца, необхідно побудувати пробну функцію, яка задовольняє дві умови, нормування і ортогональності до основного стану

$$\int d^3x |\psi_1(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n; \bar{x})|^2 = 1, \quad (6.61)$$

$$\int d^3x \psi_1^*(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n; \bar{x}) \psi^*(\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2, \dots, \tilde{\alpha}_n; \bar{x}) = 0. \quad (6.62)$$

В ідеальному випадку, коли варіаційний розв'язок співпадає з точним розв'язком рівняння Шрьодінгера для основного стану $\psi(\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2, \dots, \tilde{\alpha}_n; \bar{x}) = \varphi_0(\bar{x})$, умова (6.61) означає, що в енергетичному представленні функція $\psi_1(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n; \bar{x})$ не містить $\varphi_0(\bar{x})$:

$$\psi_1(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n; \bar{x}) = \sum_{n>0} b_n \varphi_n(\bar{x}).$$

В свою чергу умова (6.61) накладає наступне обмеження на коефіцієнти $\sum_{n>0} |b_n|^2 = 1$. Тоді середнє значення гамільтоніана за ψ_1 буде більше або рівне E_1

$$\int d^3x \psi_1^*(\bar{x}) \hat{H} \psi_1(\bar{x}) = \sum_{n>0} |b_n|^2 E_n \geq E_1 \sum_{n>0} |b_n|^2 = E_1.$$

Отже, обчислюючи мінімум функціонала

$$R_1(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n) = \int d^3x \psi_1^*(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n; \bar{x}) \hat{H} \psi_1(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n; \bar{x})$$

можна його ототожнити з енергією E_1 , а $\psi_1(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n; \bar{x})$ з хвильовою функцією збудженого стану $\Psi_1(\bar{x})$.

Далі цю процедуру можна продовжити, будуючи нормовану пробну функцію для другого збудження і т.д.

Задачі

6.1. На частинку, яка знаходиться у безмежно глибокій потенційній ямі (див. Задачу 1.9, Рис. 5), діє збурення

$$H_1 = V_0 \frac{x}{a}. \text{ Знайти поправку до енергетичних рівнів в}$$

першому порядку теорії збурень.

6.2. На одномірний гармонічний осцилятор діє збурення

$$\hat{H}_1(x) = V_0 e^{-\frac{x^2}{a^2}}, \text{ причому } a \ll \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}. \text{ Знайти поправки першого}$$

порядку до основного та першого збудженого рівнів.

6.3. Знайти рівні енергії лінійного ангармонічного осцилятора

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \kappa x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4 \right) \psi(x) = E \psi(x)$$

розглядаючи ангармонічні члени $\Delta U(x) = \alpha x^3 + \beta x^4$ як збурення. Обмежитись поправкою першого порядку.

6.4. Розглядаючи другий член потенціалу Задачі 5.2 як збурення знайти розщеплення рівнів атома літію з $n=2$ у першому порядку теорії збурень. Порівняти з результатом Задачі 5.2.

6.5. В енергетичному представленні незбурений гамільтоніан є $\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix}$. Знайти в першому порядку

теорії збурень поправки до енергій та хвильових функцій під

дією збурення $\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{12}^* & V_{22} \end{pmatrix}$.

6.6. За допомогою варіаційного метода Рітца оцінити енергію основного стану тривимірного гармонічного осцилятора, використовуючи таку пробну функцію $\psi(r) = N(1+ar)e^{-ar}$, де a варіаційний параметр. Результат порівняти з точним розрахунком (Задача 5.3).

6.7. З допомогою метода Рітца знайти наближене значення енергії основного стану для частинки, яка знаходиться у потенціалі $U(x) = \lambda x^4$. Пробну функцію узяти у вигляді $\psi(x) = Ne^{-\frac{1}{2}ax^2}$, де a - варіаційний параметр.

РОЗДІЛ 7. ЕЛЕКТРОН У ЗОВНІШНЬОМУ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ

Тепер розглянемо питання про рух електрона в електромагнітному полі. Зауважимо, що послідовна квантомеханічна теорія такого руху будується на релятивістському розгляді. Зараз обговоримо наближену модель, яка впливає з релятивістської теорії в найнижчих порядках розкладу по $\frac{v}{c}$. З цією метою спочатку виведемо гамільтоніан для класичної частинки, яка рухається в зовнішньому електромагнітному полі, а потім узагальнимо його на квантовий випадок і додамо “руками” взаємодію спіна електрона з магнітним полем.

7.1. Нерелятивістський класичний гамільтоніан для частинки в зовнішньому електромагнітному полі

Розглянемо дію для зарядженої частинки, яка знаходиться у зовнішньому полі. Як відомо з курсу теорії поля (див. Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика, т. II, Теория поля, гл. II, §8. Издательство «Наука», М. 1967 г.) дія складається з суми дії S_1 вільної частинки і дії S_2 для взаємодії частинки з полем. В спеціальній теорії відносності

$$S_1 = -Mc \int_a^b ds, \quad (7.1)$$

де інтеграл береться вздовж світової лінії, а ds – наступний інтервал

$$ds = c dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}, \quad (7.2)$$

(v - швидкість частинки). В свою чергу дію S_2 можна записати через 4-вектор електромагнітного поля A_μ , заданого в точках світової лінії

$$S_2 = -\frac{Q}{c} \int_a^b A_\mu dx^\mu, \quad (7.3)$$

де Q – заряд частинки.

Перепишемо наступним чином повну дію

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_1}^{t_2} \left(-Mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - Q\varphi + \frac{Q}{c} \vec{A} \cdot \frac{d\vec{x}}{dt} \right) dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left(-Mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - Q\varphi + \frac{Q}{c} \vec{A} \cdot \vec{v} \right) dt, \end{aligned} \quad (7.4)$$

де $A_\mu = (\varphi, \vec{A})$. Звідси знаходимо функцію Лагранжа

$$L = -Mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - Q\varphi + \frac{Q}{c} \vec{A} \cdot \vec{v}. \quad (7.5)$$

Розглядаючи нерелятивістську задачу, розкладемо корінь в ряд по степеням $\frac{v}{c}$ і відкинемо неважливий постійний член $-Mc^2$:

$$L \approx \frac{Mv^2}{2} - Q\varphi + \frac{Q}{c} \vec{A} \cdot \vec{v}. \quad (7.6)$$

Тоді узагальнений імпульс визначиться як

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = M\vec{v} + \frac{Q}{c} \vec{A} \quad (7.7)$$

і гамільтоніан, згідно загальних правил, запишеться:

$$H = \vec{p} \cdot \vec{v} - L = \frac{Mv^2}{2} + Q\varphi = \frac{1}{2M} \left(\vec{p} - \frac{Q}{c} \vec{A} \right)^2 + Q\varphi. \quad (7.8)$$

7.2. Рівняння Паулі

Перейдемо до розгляду квантового гамільтоніана для нерелятивістського електрона в зовнішньому магнітному полі. Для цього в гамільтоніані (7.8) потрібно покласти $Q = -e$, а імпульс \vec{p}

слід розглядати як диференціальний оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$. Окрім того необхідно додати енергію взаємодії спінового магнітного моменту з магнітним полем. Як відомо з курсу атомної фізики ця взаємодія є

$$\delta H = \frac{e}{Mc} \hat{s} \cdot \vec{B}, \quad (7.9)$$

де \hat{s} - оператор спіна електрона, а \vec{B} - магнітне поле.

В результаті отримуємо наступний гамільтоніан

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) + \frac{e}{Mc} \hat{s} \cdot \vec{B}. \quad (7.10)$$



Рис. 12. Вольфганг Паулі. Сформулював важливий принцип квантової механіки, який носить його ім'я, запропонував рівняння для електрона у зовнішньому магнітному полі та зробив інші важливі внески до квантової механіки.

Оператор спіна електрона записується через матриці Паулі (див. Розділ 4), які є матрицями 2×2 . Тому гамільтоніан (7.10) являє собою матрицю 2×2 , елементи якої є диференціальними операторами: перші два доданки в цьому виразі слід розглядати як одиничну 2×2 матрицю помножену на відповідний вираз, а третій доданок – (в загальному випадку) як недиагональну матрицю. В свою чергу хвильову функцію слід розглядати як спінор

$$\Psi(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{x}, t) \\ \Psi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix}, \quad (7.11)$$

елементи якого являються функціями координати і часу.

Хвильова функція $\Psi(\vec{x}, t)$ знаходиться як розв'язок рівняння Шрьодінгера з гамільтоніаном (7.10)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{x}) + \mu_b \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right] \Psi(\vec{x}, t), \quad (7.12)$$

де $\mu_b = \frac{e\hbar}{2Mc}$ - магнетон Бора. Це рівняння називається *рівнянням Паулі*.

Умова нормування для цієї хвильової функції є (див. Розділ 4)

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \int d^3x \Psi^\dagger(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t) = \\ &= \int d^3x \left[|\Psi_1(\vec{x}, t)|^2 + |\Psi_2(\vec{x}, t)|^2 \right] = 1. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Підставляючи в рівняння Паулі спінор (7.11) і використовуючи явний вигляд матриць Паулі отримаємо систему з двох зв'язаних диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi_1(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) + \mu_b B_z \right] \Psi_1(\vec{x}, t) + \mu_b (B_x - iB_y) \Psi_2(\vec{x}, t), \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_2(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) - \mu_b B_z \right] \Psi_2(\vec{x}, t) + \mu_b (B_x + iB_y) \Psi_1(\vec{x}, t). \end{cases}$$

В тому випадку, коли поле \vec{B} направлено вздовж осі z

$$\vec{B} = (0, 0, B), \quad (7.14)$$

ця система розпадається на два незалежних рівняння

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) + \mu_b B_z \right] \Psi_1(\vec{x}, t), \quad (7.15)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) - \mu_b B_z \right] \Psi_2(\vec{x}, t) \quad (7.16)$$

і має два незалежних розв'язки

$$\Psi_+(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{x}, t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.17)$$

та

$$\Psi_{-}(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_{2}(\vec{x}, t) \end{pmatrix}. \quad (7.18)$$

Використовуючи явний вигляд матриць Паулі легко переконатися, що ці хвильові функції є власними функціями оператора проекції спіна електрона на вісь z з власними значеннями $+\frac{\hbar}{2}$ і $-\frac{\hbar}{2}$.

Знайдемо швидкість електрона в магнітному полі. З огляду на те, що опис ведеться в представленні Шрьодінгера, оператор швидкості частинки можна отримати на основі формули (1.57):

$$\begin{aligned} \vec{v} = \dot{\vec{x}} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{i}{2\hbar M} \left[\left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2, \vec{x} \right] = \\ &= \frac{i}{2\hbar M} \left\{ [\hat{p}^2, \vec{x}] + \frac{e}{c} [(\hat{p} \cdot \vec{A}), \vec{x}] + \frac{e}{c} [(\vec{A} \cdot \hat{p}), \vec{x}] \right\} = \\ &= \frac{1}{M} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right). \end{aligned} \quad (7.19)$$

Обчислимо тепер комутатор швидкостей:

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = \frac{-e}{M^2 c} \left([\hat{p}_j, A_i] - [\hat{p}_i, A_j] \right). \quad (7.20)$$

Підставляючи сюди явний вигляд оператора імпульсу одержимо

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = \frac{e\hbar}{iM^2 c} \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \right). \quad (7.21)$$

З курсу теорії поля відомо, що $\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i} = \varepsilon_{jik} B_k$ і (7.20) зведеться

до

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = i \frac{e\hbar}{M^2 c} \varepsilon_{ijk} B_k. \quad (7.22)$$

Таким чином, оператори швидкості в площині, перпендикулярній до напрямку поля, виявляються некомутативними. Це означає, що

електрон не може одночасно мати певних значень швидкості по цих напрямках.

7.3. Калібровочна інваріантність

Відомо, що рівняння електродинаміки не змінюються, якщо до вектор-потенціалу \vec{A} додати градієнт довільної функції координат. Цю властивість називають *градієнтною* або *калібровочною* інваріантністю. Подивимося, як ця інваріантність реалізується в квантовому випадку.

Перш за все відмітимо, що ймовірність виявити частинку в деякій точці не змінюється, якщо зробити заміну:

$$\psi \rightarrow \psi' = \exp\left\{-i \frac{e}{\hbar c} f(\vec{x})\right\} \psi, \quad (7.23)$$

оскільки при цьому

$$\rho = |\psi|^2 \rightarrow \rho' = |\psi'|^2 = \rho. \quad (7.24)$$

Перетворення (7.23) називають *локальним калібровочним перетворенням* (на відміну від *глобального калібровочного перетворення*, тобто випадку, коли в (7.23) f константа).

Вияснимо, що відбувається з рівнянням Паулі при локальному калібровочному перетворенні. З цією метою

розглянемо дію оператора $\left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2$ на хвильову функцію, яку

одержано при локальному калібровочному перетворенні:

$$\begin{aligned} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2 \psi &\rightarrow \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2 \exp\left\{-i \frac{e}{\hbar c} f(\vec{x})\right\} \psi = \\ &= \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A}\right) \exp\left\{-i \frac{e}{\hbar c} f(\vec{x})\right\} \left[\hat{p} + \frac{e}{c} (\vec{A} - \nabla f)\right] \psi = \\ &= \exp\left\{-i \frac{e}{\hbar c} f(\vec{x})\right\} \left[\hat{p} + \frac{e}{c} (\vec{A} - \nabla f)\right]^2 \psi. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Таким чином, рівняння Паулі виявляється інваріантним, якщо одночасно зробити наступні перетворення для хвильової функції і вектор-потенціалу

$$\psi \rightarrow \psi' = \exp\left\{-i\frac{e}{\hbar c}f(\vec{x})\right\}\psi, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \nabla f(\vec{x}). \quad (7.26)$$

Така інваріантність рівняння називається калібровочною. Вважається, що калібровочна інваріантність є однією з фундаментальних властивостей природи. Зокрема, її природне узагальнення лежить в основі теорії слабких і електромагнітних взаємодій, а також фундаментальної теорії сильних взаємодій – квантової хромодинаміки, що описує взаємодію кольорових кварків і глюонів.

7.4. Електрон в однорідному магнітному полі

Знайдемо комутатор

$$\left[\hat{p}, \vec{A}\right] = \frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial}{\partial \vec{x}}, \vec{A}\right] = \frac{\hbar}{i}\operatorname{div}\vec{A}. \quad (7.27)$$

Значить, оператор імпульсу \hat{p} і вектор-потенціал \vec{A} комутативні тільки, якщо $\operatorname{div}\vec{A} = 0$. Це справедливо для вектор-потенціалу постійного однорідного магнітного поля

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}. \quad (7.28)$$

Отже,

$$\begin{aligned} \left(\hat{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 &= \hat{p}^2 + \frac{e}{c}\vec{B} \cdot (\vec{r} \times \hat{p}) + \left(\frac{e}{2c}\right)^2 (\vec{B} \times \vec{r})^2 = \\ &= \hat{p}^2 + \frac{e}{c}\vec{B} \cdot \hat{L} + \left(\frac{e}{2c}\right)^2 (\vec{B} \times \vec{r})^2. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Підставивши цей вираз в рівняння Паулі, отримаємо:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2M} \left[\hat{p}^2 + \frac{e}{c}\vec{B} \cdot (\hat{L} + 2\hat{s}) + \left(\frac{e}{2c}\right)^2 (\vec{B} \times \vec{r})^2 \right] \psi. \quad (7.30)$$

Таким чином, оператор Гамільтона для електрона в зовнішньому постійному магнітному полі містить, крім знайомого нам з курсу атомної фізики члена, лінійного по полю, член, квадратично залежний від поля. Трохи далі вивчимо деякі наслідки, до яких приводить останній.

7.5. Атом в зовнішньому магнітному полі

7.5.1. Ефект Зеемана

Розглянемо, як змінюються енергетичні рівні в атомі, коли останній поміщений в зовнішнє постійне магнітне поле.

З цією метою розглянемо рівняння Паулі для атома у зовнішньому магнітному полі \vec{B} . Будемо вважати, що магнітне поле достатньо мале і тому можна знехтувати членом, квадратичним по \vec{B} . Тоді гамільтоніан прийме вигляд

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (7.31)$$

де \hat{H}_0 - гамільтоніан атома при виключеному полі, а \hat{H}_1 - гамільтоніан взаємодії атома з полем,

$$\hat{H}_1 = \frac{e}{2Mc} \vec{B} \cdot (\hat{l} + 2\hat{s}). \quad (7.32)$$

З огляду на те, що гамільтоніан (7.31) не залежить від часу, будемо шукати стаціонарний розв'язок рівняння Паулі

$$\Psi = \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) \psi, \quad (7.33)$$

де ψ залежить лише від координат електронів і задовольняє наступне рівняння

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_1) \psi = E \psi, \quad (7.34)$$

причому \hat{H}_1 вважається гамільтоніаном збурення. Для визначеності будемо вважати, що магнітне поле направлено вздовж осі z : $\vec{B} = (0, 0, B)$.

При вимкненому полі \vec{B} розв'язки, які будемо позначати $|njls m\rangle$, характеризуються наступними квантовими числами: головним квантовим числом n , повним моментом кількості руху електрона j , орбітальним квантовим числом l , спіном s і проекцією на вісь z повного моменту m (останнє квантове число називають магнітним квантовим числом). Енергетичні рівні задаються розв'язком рівняння Шрьодінгера

$$\left(\hat{H}_0 - E_{nl}\right)|njls m\rangle = 0 \quad (7.35)$$

і являються виродженими по магнітному квантовому числу m . Це пов'язано з тим, що гамільтоніан \hat{H}_0 сферично симетричний і тому нема виділеного напрямку. Зовнішнє магнітне поле зружує сферичну симетрію до аксіальної симетрії. В результаті в найнижчому порядку теорії збурень поправка до енергетичного рівня E_{ns} буде залежати від m , тобто виродження по m знімається:

$$\begin{aligned} \Delta E_{njls m} &= \langle njls m | \hat{H}_1 | njls m \rangle = \\ &= \frac{e}{2mc} B \langle njls m | \hat{l}_z + 2\hat{s}_z | njls m \rangle. \end{aligned} \quad (7.36)$$

Виразимо оператор $\hat{l} + 2\hat{s}$ через оператор повного моменту кількості руху $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$:

$$\hat{l} + 2\hat{s} = \hat{j} + \hat{s} = \hat{g}\hat{j}, \quad (7.37)$$

де \hat{g} - деякий оператор, явний вид якого нам потрібно знайти. З цією метою помножимо скалярно (7.37) на \hat{j} :

$$\hat{j}^2 + \hat{j} \cdot \hat{s} = \hat{g}\hat{j}^2 \quad (7.38)$$

або

$$\hat{g} = 1 + \frac{\hat{j} \cdot \hat{s}}{\hat{j}^2}. \quad (7.39)$$

З іншої сторони:

$$\hat{l}^2 = \hat{j}^2 + \hat{s}^2 - 2\hat{j} \cdot \hat{s}. \quad (7.40)$$

Звідки:

$$\hat{g} = 1 + \frac{\hat{j}^2 + \hat{s}^2 - \hat{l}^2}{2\hat{j}^2}. \quad (7.41)$$

Хвильова функція $|njls m\rangle$ є власною функцією як оператора \hat{j}_z , так і оператора \hat{g} . В результаті:

$$\langle njls m | \hat{l}_z + 2\hat{s}_z | njls m \rangle = g_{jls} \langle njls m | \hat{j}_z | njls m \rangle = g_{jls} m, \quad (7.42)$$

де

$$g_{jls} = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (7.43)$$

називається *множником Ланде*.

Для енергії маємо наступний вираз:

$$E_{njls m} = E_{nl} + \mu_B g_{jls} B m. \quad (7.44)$$

Таким чином, зовнішнє магнітне поле знімає $2j+1$ -кратне виродження рівня, причому зміщення відбувається симетрично відносно незміщеного рівня. Це явище називають *аномальним ефектом Зеемана*. У випадку, коли спін атома дорівнює нулю, $s=0$, $j=l$, $g_{ll0}=1$ і величина розщеплення не залежить від квантових чисел:

$$\Delta E = \mu_B B m. \quad (7.45)$$

Таке розщеплення називається *нормальним ефектом Зеемана*.

Величина

$$\mu = -\frac{\partial \Delta E_{\text{мак}}}{\partial B} = -\mu_B g_{jls} j \quad (7.46)$$

називається *магнітним моментом* атома.

7.5.2. Магнітна сприйнятливість

Друга похідна від добавки до енергії атома в магнітному полі з від'ємним знаком називається *магнітною сприйнятливістю*:

$$\chi = -\frac{\partial^2 \Delta E_{\text{мак}}}{\partial B^2}. \quad (7.47)$$

Вона показує величину додаткового магнітного моменту атома, яку він отримує за рахунок взаємодії з зовнішнім магнітним полем. У випадку, коли χ є додатною величиною, говорять, що атому властивий *парамагнетизм*, якщо вона від'ємна, то говорять про *діамагнетизм* атома.

Розрахуємо χ в найпростішому випадку, коли $l = s = 0$ і, відповідно, магнітний момент рівний нулю. Як витікає з рівняння (7.30), завдяки останньому членові в правій частині цього рівняння (який пропорційний квадрату напруженості поля B^2) магнітна сприйнятливість виявляється ненульовою вже в першому порядку теорії збурень. Дійсно, в цьому випадку добавка до енергії атома буде

$$\Delta E = \frac{e^2}{8Mc^2} B^2 \langle l=0, s=0 | \sin^2 \theta r^2 | l=0, s=0 \rangle \quad (7.48)$$

(знову вважається, що поле вибране направленим вздовж осі z). Для s -станів інтеграл по кутам обчислюється елементарно і відповідний матричний елемент легко виражається через середньоквадратичний радіус атома:

$$\begin{aligned} \langle l=0, s=0 | \sin^2 \theta r^2 | l=0, s=0 \rangle &= \\ &= \frac{2}{3} \langle l=0, s=0 | r^2 | l=0, s=0 \rangle \equiv \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle. \end{aligned} \quad (7.49)$$

Отже, магнітна сприйнятливість виявляється від'ємною,

$$\chi_{l=0} = -\frac{e^2}{6Mc^2} \langle r^2 \rangle, \quad (7.50)$$

і для атома властивий діамагнетизм.

В іншому випадку, коли $l \neq 0$ або $s \neq 0$, атоми будуть вести себе як жорсткі диполі з магнітним моментом μ (7.46). Зі статистичної фізики відомо, що газ таких диполів буде парамагнітним з магнітною сприйнятливістю

$$\chi_{l \neq 0} = \frac{\mu B^2}{3} \frac{l(l+1)}{kT}, \quad (7.51)$$

де k - стала Больцмана, а T - температура. Проста оцінка показує, що діамагнітна сприйнятливість атома набагато менше парамагнітної (7.51) і тому першу можна не враховувати при розгляді магнітних властивостей речовини.

7.5.3. Рівні Ландау

На основі градієнтної інваріантності замість вектор-потенціалу (7.28) можна вибрати інший

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} + \nabla f(\vec{r}). \quad (7.52)$$

Покладаючи $f = -\frac{1}{2} \chi y B$ отримаємо

$$\vec{A} = (-By, 0, 0). \quad (7.53)$$

Тоді гамільтоніан для електрона запишеться

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \left[\left(\hat{p}_x - \frac{eBy}{c} \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] + \mu_B \sigma_z B. \quad (7.54)$$

Він очевидно комутує з операторами \hat{p}_x , \hat{p}_z^2 і σ_z . Отже, власну хвильову функцію гамільтоніана варто шукати у вигляді:

$$\psi(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)} \chi_{\pm}(y), \quad (7.55)$$

де p_x і p_z - довільні імпульси, $\chi_+(y) = \begin{pmatrix} \varphi_+(y) \\ 0 \end{pmatrix}$ і

$$\chi_-(y) = \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_-(y) \end{pmatrix} \quad (\text{в залежності від напрямку спіну електрона}).$$

Функції $\varphi_{\pm}(y)$ визначаються з рівняння на власні значення

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M} \varphi_{\pm}''(y) + \left[\frac{e^2 B^2}{2Mc^2} (y + y_0)^2 + \frac{p_z^2}{2M} \pm \mu_B B \right] \varphi_{\pm}(y) = \\ = E^{(\pm)} \varphi_{\pm}(y), \end{aligned} \quad (7.56)$$

де $y_0 = \frac{p_x c}{eB}$. Це рівняння гармонічного осцилятора з частотою

$$\omega = \frac{eB}{Mc}, \quad (7.57)$$

якому відповідає спектр енергії

$$\begin{aligned} E^{(\pm)} &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2M} \pm \mu_B B = \\ &= 2\mu_B B \left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2M}. \end{aligned} \quad (7.58)$$

Таким чином енергія електрона, який знаходиться в магнітному полі, квантується. Відповідні рівні називаються *рівнями Ландау*.

Енергетичний спектр (7.58) вироджений. По-перше, має місце виродження по спіну, $E_n^{(+)} = E_{n+1}^{(-)}$. По-друге, спектр вироджений неперервним чином по p_x .

7.6. Ефект Штарка

7.6.1. Якісний розгляд ефекту Штарка

Під дією зовнішнього електричного поля напруженості \vec{E} стаціонарні рівні атома зміщуються. Це явище називається *ефектом Штарка*. Розглянемо спочатку загальні властивості цього ефекту, обумовлені тільки симетрією задачі.

Гамільтоніан електрона, який утримується в центрально-симетричному полі $U(r)$ і знаходиться в зовнішньому однорідному електричному полі, є

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + U(r) - \vec{E} \cdot \vec{d} = \hat{H}_0 - \vec{E} \cdot \vec{d} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (7.59)$$

де $\vec{d} = -e\vec{r}$ - дипольний момент атома. Будемо розглядати доданок $-\vec{E} \cdot \vec{d}$ як збурення. При вимкненому збуренні $\vec{E} = 0$ гамільтоніан має центральну симетрію і його власні функції характеризуються

головним квантовим числом n , орбітальним квантовим числом l і магнітним квантовим числом m . Тому далі відповідний вектор стану будемо позначати $|nlm\rangle$. При цьому в загальному випадку має місце виродження по магнітному квантовому числу m . Як відомо з курсу атомної фізики, для випадку чисто кулонівського потенціалу (воднеподібні атоми) рівні енергії мають додаткове виродження по орбітальному квантовому числу l .

Виберемо систему координат так, щоб вісь z була напрямлена вздовж поля $\vec{E} = (0, 0, E)$. Тоді збурення

$$\hat{H}_1 = -\vec{E} \cdot \vec{d} = ezE = eEr \cos \theta \quad (7.60)$$

і сферична симетрія гамільтоніана звужується до аксіальної симетрії. Ця симетрія виражається в тому, що, по-перше, гамільтоніан виявляється симетричним відносно поворотів на довільний кут φ_0 навколо осі z

$$\varphi \rightarrow \varphi + \varphi_0, \quad \theta \rightarrow \theta. \quad (7.61)$$

По-друге, гамільтоніан виявляється інваріантним відносно віддзеркалення від будь-якої площини, що проходить через вісь z . В сферичних координатах такому віддзеркаленню відповідає дискретне перетворення:

$$\varphi \rightarrow \varphi_0 - \varphi, \quad \theta \rightarrow \theta. \quad (7.62)$$

Варто сказати, що якщо перша з цих симетрій мала місце також і для атома в зовнішньому магнітному полі, то друга симетрія там не має місця. Дійсно, в сферичних координатах оператор \hat{l}_z виглядає як:

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (7.63)$$

і збурення для ефекту Зеемана є (для простоти ми розглядаємо заряджену частинку без спіну)

$$\hat{H}_1^{\text{Зеем.}} = \frac{\hbar}{i} \frac{e}{2Mc} B \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (7.64)$$

Звідси видно, що при перетворенні (7.62) магнітне квантове число і $\hat{H}_1^{\text{Зеем.}}$ змінюють знак, в той час, як збурення (7.60) залишається

незмінним. З цього випливає, що у випадку ефекту Штарка зняття виродження відбувається тільки по абсолютному значенню магнітного квантового числа:

$$E_{nlm} = E_{nl-m}. \quad (7.65)$$

Іншими словами, для атома в зовнішньому електричному полі має місце тільки часткове зняття виродження, а у випадку ефекту Зеемана відбувається повне зняття виродження по магнітному квантовому числу.

Розглянемо зміщення рівнів за рахунок збурення (7.60) по теорії збурень. В першому порядку зміна енергії рівня

$$\Delta E_{nlm} = e|\bar{E}| \langle nlm | z | nlm \rangle. \quad (7.66)$$

Однак із міркувань симетрії випливає, що в цьому виразі підінтегральна функція буде непарною по z і тому інтеграл дорівнюватиме нулю:

$$\langle nlm | z | nlm \rangle = 0. \quad (7.67)$$

Таким чином, в першому порядку теорії збурень зміщення енергії виявляється рівним нулю і тому необхідно проводити розрахунок в другому порядку. В результаті зміщення рівнів виявляється пропорційним квадрату напруженості поля. Виключення складають воднеподібні атоми, у яких є додаткове виродження і тому необхідно використовувати теорію збурень для вироджених рівнів. В результаті цим атомам властивий лінійний ефект Штарка.

7.6.2. Лінійний ефект Штарка

Перш за все розглянемо матричний елемент оператора взаємодії \hat{H}_1 . Використовуючи явний вигляд сферичних функцій (5.10), пишемо:

$$\begin{aligned} \langle nl'm' | \hat{H}_1 | nlm \rangle &= \frac{(-1)^{m+m'+1}}{4\pi} eE \sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)(l-m)!(l'-m')!}{(l+m)!(l'+m')!}} \times \\ &\times \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-m')\varphi} \int_{-1}^1 du u P_l^m(u) P_{l'}^{m'}(u) \int_0^\infty dr r R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) = \delta_{mm'} \tilde{W}_{nl'l'}^m, \end{aligned} \quad (7.68)$$

де $u = \cos \theta$. Скористаємося властивістю (Д.8) і умовою ортогональності (Д.7) для приєднаних поліномів Лежандра і отримаємо:

$$\langle n'l'm' | \hat{H}_1 | nlm \rangle = \delta_{mm'} (\delta_{l+1,l'} W_{nl}^m + \delta_{l-1,l'} W_{nl-1}^m), \quad (7.69)$$

де

$$W_{nl}^m = -eE \sqrt{\frac{(l+m+1)!(l-m+1)!}{(2l+1)(2l+3)(l+m)!(l-m)!}} \int_0^\infty dr r R_{nl}(r) R_{n(l+1)}(r).$$

У зв'язку з тим, що надалі квантові числа m та n фіксовані, їх будемо опускати у позначеннях матричних елементів W_{nl}^m .

З (7.69) випливає, що взаємодія не перемішує стани з різними значеннями магнітного квантового числа. Це означає, що стани з різними значеннями m варто розглядати окремо. Тоді, згідно загальним правилам теорії збурень, потрібно вже в нульовому наближенні вибрати хвильову функцію з фіксованими значеннями m і n у вигляді лінійної суперпозиції станів з різними значеннями орбітального квантового числа l :

$$|nm\rangle = \sum_{l=|m|}^{n-1} \alpha_l |nlm\rangle. \quad (7.70)$$

Далі, використовуючи те, що матричні елементи (7.69) відмінні від нуля тільки при умові $l-l' = \pm 1$, отримаємо, що система рівнянь (6.38) зводиться до системи $N = n - |m|$ рівнянь

$$\begin{aligned} \alpha_{n-1} \Delta E + \alpha_{n-2} W_{n-2} &= 0, \\ \alpha_{n-1} W_{n-2} + \alpha_{n-2} \Delta E + \alpha_{n-3} W_{n-3} &= 0, \\ \alpha_{n-2} W_{n-3} + \alpha_{n-3} \Delta E + \alpha_{n-4} W_{n-4} &= 0, \\ \dots & \\ \alpha_{|m|+2} W_{|m|+1} + \alpha_{|m|+1} \Delta E + \alpha_{|m|} W_{|m|} &= 0, \\ \alpha_1 W_{|m|} + \alpha_{|m|} \Delta E &= 0, \end{aligned} \quad (7.71)$$

де $\Delta E = E_n - E$, а E_n - енергія n -го збудженого рівня атома водню. При цьому секулярне рівняння зводиться до

$$D_N = \det(M_N) = 0, \quad (7.72)$$

де (M_N) - наступна матриця $N \times N$:

$$(M_N) = \begin{pmatrix} \Delta E & W_{n-2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ W_{n-2} & \Delta E & W_{n-3} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & W_{n-3} & \Delta E & W_{n-4} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & W_{|m|+1} & \Delta E & W_{|m|} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & W_{|m|} & \Delta E \end{pmatrix}. \quad (7.73)$$

Враховуючи, що матриця має наступну структуру

$$(M_N) = \begin{pmatrix} & & & 0 \\ & (M_{N-1}) & & \vdots \\ & & & W_{|m|} \\ 0 & \dots & W_{|m|} & \Delta E \end{pmatrix} \quad (7.74)$$

легко отримати рекурентну формулу для детермінанта:

$$D_N = \Delta E D_{N-1} - W_{|m|}^2 D_{N-2}, \quad \text{де } N \geq 3. \quad (7.75)$$

При цьому $D_1 = \Delta E$, а $D_2 = \Delta E^2 - W_{n-2}^2$. В результаті отримаємо, що детермінант має вигляд

$$D_N = \begin{cases} \Delta E P_N(\Delta E^2) & \text{для непарного } N, \\ P_N(\Delta E^2) & \text{для парного } N, \end{cases} \quad (7.76)$$

де P_N - деякі поліноми. Звідси випливає, що при непарному N зміщуються лише $N-1$ рівня, а один рівень залишається незміщеним (у секулярного рівняння завжди є корінь $\Delta E = 0$). Зміщення цього рівня відбувається в другому порядку теорії збурень і тому пропорційне квадрату напруженості електричного поля. У випадку парного N всі стани розщеплюються. Величина розщеплення пропорційна полю.

Для прикладу розглянемо перший і другий збуджені рівні атома водню, які відповідають значенням головного квантового числа $n = 2$ і $n = 3$.

Перший рівень має чотириократне виродження, якому відповідають чотири стани

$$|211\rangle, |21-1\rangle, |210\rangle, |200\rangle. \quad (7.77)$$

Єдиний ненульовий матричний елемент переходу рівний

$$W_0 = \langle 211 | \hat{H}_1 | 200 \rangle = \langle 200 | \hat{H}_1 | 210 \rangle = 3a_0 eE, \quad (7.78)$$

де a_0 - радіус Бора. Таким чином, стани атома $|21\pm 1\rangle$ не змішуються, а їх енергії залишаються рівними $E_2^{(0)}$. Для станів з $m = 0$ пишемо

$$|20\rangle = \alpha_1 |210\rangle + \alpha_0 |200\rangle. \quad (7.79)$$

Коефіцієнти α_1 і α_0 задовольняють рівняння

$$\begin{aligned} \alpha_1 (E_2^{(0)} - E) + 3\alpha_0 a_0 eE &= 0, \\ 3\alpha_1 a_0 eE + \alpha_0 (E_2^{(0)} - E) &= 0, \end{aligned} \quad (7.80)$$

звідки

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= -\alpha_0 \frac{3a_0 eE}{E_2^{(0)} - E}, \\ E &= E_2^{(0)} \pm 3a_0 eE. \end{aligned} \quad (7.81)$$

Отже, стани атома $|200\rangle$ і $|210\rangle$ змішуються.

Тепер розглянемо рівень з $n = 3$. Він має дев'ятикратне виродження. Стани $|32\pm 2\rangle$ не змішуються і відповідні рівні не змішуються. Рівні з $m = \pm 1$ розщеплюються на два, а стани $|32\pm 1\rangle$ і $|31\pm 1\rangle$ змішуються. Якісно тут все відбувається дуже подібно до того, що було зі станами $|200\rangle$ і $|210\rangle$. Інтерес представляють рівні з $m = 0$. Хвильову функцію шукаємо у вигляді суперпозиції трьох станів

$$|30\rangle = \alpha_2 |320\rangle + \alpha_1 |310\rangle + \alpha_0 |300\rangle, \quad \alpha_2^2 + \alpha_1^2 + \alpha_0^2 = 1. \quad (7.82)$$

Підставляючи її в рівняння Шрьодінгера отримаємо систему рівнянь

$$\begin{aligned} \alpha_2 (E_3^{(0)} - E) + \alpha_1 W_2 &= 0, \\ \alpha_1 (E_3^{(0)} - E) + \alpha_2 W_2 + \alpha_0 W_1 &= 0, \\ \alpha_1 W_1 + \alpha_0 (E_3^{(0)} - E) &= 0, \end{aligned} \quad (7.83)$$

де

$$\begin{aligned} W_1 &= \langle 310 | \hat{H}_1 | 300 \rangle = \langle 300 | \hat{H}_1 | 310 \rangle = 3\sqrt{6}a_0 eE, \\ W_2 &= \langle 320 | \hat{H}_1 | 310 \rangle = \langle 310 | \hat{H}_1 | 320 \rangle = \frac{4}{\sqrt{3}} a_0 eE. \end{aligned} \quad (7.84)$$

В результаті вікове рівняння зводиться до

$$(E_3^{(0)} - E)^3 - (W_1^2 + W_2^2)(E_3^{(0)} - E) = 0. \quad (7.85)$$

Звідки отримуємо

$$E = E_3^{(0)}, \quad \psi_0 = \sqrt{W_1^2 + W_2^2} \left(\frac{1}{W_2} |320\rangle - \frac{1}{W_1} |310\rangle \right), \quad (7.86)$$

$$E = E_3^{(0)} \pm \sqrt{W_1^2 + W_2^2},$$

$$\psi_{I,II} = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\frac{W_2}{\sqrt{W_1^2 + W_2^2}} |320\rangle \pm \frac{W_1}{\sqrt{W_1^2 + W_2^2}} |310\rangle \right). \quad (7.87)$$

Отже, в розщепленні по полю залишається додаткове виродження.

7.6.3. Квадратичний ефект Штарка

Тепер розглянемо ефект Штарка для не воднеподібних атомів. Для них зміщення рівнів відбувається, починаючи з другого порядку теорії збурень. При цьому змішуються рівнів з орбітальними моментами l , що відрізняються на одиницю. Дійсно, згідно загальної теорії, для стану $|nlm\rangle$ енергія змінюється на величину

$$\Delta E_{nlm}^2 = \sum_{n \neq n'} \sum_{l \neq l'} \sum_{m \neq m'} \frac{\langle nlm | \hat{H}_1 | n'l'm' \rangle \langle n'l'm' | \hat{H}_1 | nlm \rangle}{E_{nl}^{(0)} - E_{n'l'}^{(0)}} \quad (7.88)$$

де матричний елемент записаний як інтеграл в сферичних координатах

$$\langle nlm | \hat{H}_1 | n'l'm' \rangle = e \int_0^\infty dr r R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi).$$

Тоді використовуючи властивості сферичних функцій одразу бачимо, що ненульовими матричними елементами є лише матричні елементи з $m = m'$. Це і виправдовує те, що ми з самого початку не звертали уваги на виродження спектра по магнітному квантовому числу. Далі, використовуючи співвідношення (Д.8), отримаємо наступну структуру для матричного елемента

$$\langle nlm | \hat{H}_1 | n'l'm' \rangle = \delta_{mm'} (\delta_{l'l'+1} W_{nl}^1 - \delta_{l'l'-1} W_{nl}^2),$$

де явний вигляд $W_{nl}^{1,2}$ ми не випишемо.

На основі наведених вище формул видно, що зміщення енергії виявляється пропорційним квадрату напруженості електричного поля. Такий ефект називається квадратичним ефектом Штарка.

Величина

$$-\frac{\partial E}{\partial E} = \alpha E$$

має зміст дипольного моменту, індукованого за рахунок зовнішнього електричного поля, причому α називається електричною поляризованістю атома.

Потрібно відмітити, що при розгляді ефекту Штарка ми ігнорували той факт, що під дією зовнішнього електричного поля електрон може тунелювати крізь потенційний бар'єр, як це показано на Рис. 13. В результаті цього атом іонізується. Проте при невеликих збудженнях атому та невеликих полях у першому наближенні ефектом тунелювання можна знехтувати.

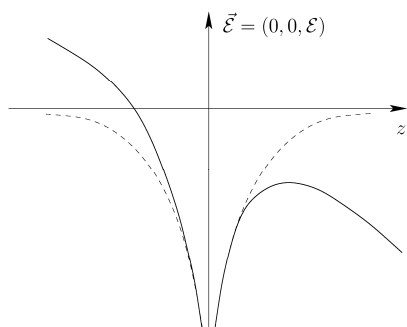


Рис. 13. Потенціал для електрона у атомі, який знаходиться у зовнішньому електричному полі $\vec{E} = (0, 0, E)$. Пунктиром позначено потенціал для випадку, коли зовнішнє поле виключено.

Задачі

7.1. Отримати рівняння неперервності для зарядженої частинки, яка знаходиться у зовнішньому магнітному полі. Що буде струмом густини ймовірності?

7.2. Знайти оператор прискорення для зарядженої частинки без спіна у зовнішньому електромагнітному полі.

7.3. Знайти похідну по часу від оператора спіна електрона, який знаходиться у зовнішньому магнітному полі.

7.4. Нейтрон знаходиться у магнітному полі \vec{B} . Знайти оператор його прискорення. Відомо, що електричний заряд у нейтрона відсутній, проте магнітний момент відмінний від нуля, $\mu_n \approx -1,913$ ядерних магнетонів.

7.5. Нейтрон знаходиться у зовнішньому магнітному полі, яке змінюється по такому закону

$$B_x = B \cos \omega t, \quad B_y = B \sin \omega t, \quad B_z = B'.$$

Знайти закон зміни ймовірності різних значень проекції спіну s_z з часом при умові, що в момент часу $t=0$ проекція спіну $s_z(t=0) = 1/2$. Розглянути граничний випадок, коли $B \ll B'$.

7.6. Знайти діамагнітну сприйнятливість атомарного водню. Вважити, що атоми перебувають в основному стані.

7.7. Гармонічний осцилятор знаходиться у зовнішньому електричному полі. Знайти його енергетичні рівні та хвильові

функції. Задачу розв'язати точно та по теорії збурень у першому та другому порядках.

РОЗДІЛ 8. НЕСТАЦІОНАРНА ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ

8.1. Розрахунок ймовірності переходу

До цієї пори вважалося, що збурення не залежить від часу. Однак, в багатьох задачах приходиться розглядати квантово-механічні системи, що знаходяться в полі, яке явним чином залежить від часу. Зараз розглянемо такий випадок. При цьому будемо припускати, що гамільтоніан може бути представлений в вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t), \quad (8.1)$$

де \hat{H}_0 не залежить від часу, а $\hat{H}_1(t)$ описує мале збурення. Будемо також допускати, що розв'язок рівняння Шрьодінгера для незбуреного гамільтоніана \hat{H}_0 відомий:

$$\Psi_n^0(\vec{x}, t) = \Psi_n^0(\vec{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right), \quad (8.2)$$

де E_n - власне значення незбудженого оператора Гамільтона \hat{H}_0 . Задача полягає в тому, щоб виразити розв'язок рівняння Шрьодінгера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = [\hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)] \Psi(\vec{x}, t) \quad (8.3)$$

через розв'язок (8.2). Будемо це робити за допомогою *методу варіації сталих*, запропонованого для цієї задачі Діраком.

Зауважимо, що в даному випадку енергія вже не є інтегралом руху. Тому метою є не розрахунок енергетичних рівнів, а обчислення ймовірності переходу з одного квантового стану в інший під дією збурення $\hat{H}_1(t)$.

Будемо шукати розв'язок рівняння (8.3) в вигляді

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{x}, t) &= \sum_k c_k(t) \Psi_k^0(\vec{x}, t) = \\ &= \sum_k c_k(t) \Psi_k^0(\vec{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_k t\right). \end{aligned} \quad (8.4)$$

Підставляючи (8.4) в рівняння Шрьодінгера (8.3), отримаємо після очевидних перетворень наступну систему рівнянь на коефіцієнти $c_k(t)$

$$i\hbar \frac{dc_k}{dt} = \sum_n \langle k | \hat{H}_1 | n \rangle e^{i\omega_{kn}t} c_n, \quad (8.5)$$

де частота ω_{kn} визначається формулою Бора $\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$.

Будемо вважати, що взаємодія відбувається тільки в скінченний проміжок часу:

$$\hat{H}_1(t) = \begin{cases} 0, & \text{при } t \leq 0, \\ \hat{W}(t), & \text{при } 0 < t < \tau, \\ 0, & \text{при } t \geq \tau. \end{cases} \quad (8.6)$$

Крім того, припустимо, що до вмикання взаємодії ($t \leq 0$) система знаходиться в квантовому стані з енергією E_m :

$$\Psi_{\text{поч.}}(\vec{x}, t) = \Psi_m^0(\vec{x}, t), \quad \text{при } t \leq 0. \quad (8.7)$$

Тобто при $t < 0$ коефіцієнти c_n сталі і рівні

$$c_n(t) = \delta_{nm}. \quad (8.8)$$

Після вмикання коефіцієнти c_n почнуть змінюватися з часом. Потім, починаючи з моменту часу $t = \tau$, c_n знову приймуть постійні значення $c_n(\tau)$. Таким чином, за час дії збурення система перейде з квантового стану m (яке характеризується хвильовою функцією (8.7)) в стан, що характеризується хвильовою функцією

$$\Psi_{\text{кін.}}(\vec{x}, t) = \sum_n c_n(\tau) \Psi_n^0(\vec{x}, t), \quad t \geq \tau. \quad (8.9)$$

Фізичний зміст коефіцієнтів $c_n(\tau)$ в (8.9) очевидний – вони представляють собою амплітуду ймовірності того, що в кінцевому стані система знаходиться в стаціонарному стані з енергією E_n . З іншої сторони, їх можна також розглядати як амплітуду переходу з

квантового стану m в квантовий стан n під дією збурення $\hat{H}_1(t)$.

Таким чином для ймовірності такого переходу маємо

$$w_{nm} = |c_n(\tau)|^2. \quad (8.10)$$

Отже, для обчислення ймовірності переходу $m \rightarrow n$ необхідно розв'язати систему рівнянь (8.5) з початковою умовою (8.8). З цією метою розкладемо коефіцієнти в ряд по взаємодії:

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots, \quad (8.11)$$

де індекс зверху означає степінь малості по збуренню. Причому початкова умова (8.8) дає

$$c_n^{(0)}(t) = c_n(0) = \delta_{nm}. \quad (8.12)$$

Підставляючи (8.12) в праву частину (8.5), отримаємо рівняння для коефіцієнтів в першому порядку по взаємодії

$$i\hbar \frac{dc_n^{(1)}}{dt} = \sum_k W_{nk}(t) e^{i\omega_{nk}t} \delta_{km} = W_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t}, \quad (8.13)$$

де введено таке позначення $W_{nm}(t) \equiv \langle n | \hat{W}(t) | m \rangle$. Інтегруючи (8.13), отримаємо

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t W_{nm}(t') e^{i\omega_{nm}t'} dt'. \quad (8.14)$$

Відмітимо, що цей вираз можна також переписати у вигляді

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle n | \int_0^t \tilde{W}(t') dt' | m \rangle, \quad (8.15)$$

де $\tilde{W}(t)$ - оператор збурення в представленні взаємодії:

$$\tilde{W}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \hat{W}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right). \quad (8.16)$$

Аналогічно отримаємо для другого порядку

$$c_n^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_k \int_0^t W_{nk}(t') e^{i\omega_{nk}t'} c_k^{(1)}(t') dt' = \quad (8.17)$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_k \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' W_{nk}(t') e^{i\omega_{nk}t'} W_{km}(t'') e^{i\omega_{km}t''} = \\
&= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_k \langle n | \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \tilde{W}(t') | k \rangle \langle k | \tilde{W}(t'') | m \rangle = \\
&= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \langle n | \int_0^t dt' \tilde{W}(t') \int_0^{t'} dt'' \tilde{W}(t'') | m \rangle = \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \langle n | P \int_0^t dt' \tilde{W}(t') \int_0^t dt'' \tilde{W}(t'') | m \rangle.
\end{aligned}$$

Оператор P називають *хронологічним оператором*. Він введений для більш симетричного запису остаточного виразу. Хронологічний оператор упорядковує по часу добуток операторів, наприклад,

$$P \hat{A}_1(t_1) \hat{A}_2(t_2) = \begin{cases} \hat{A}_1(t_1) \hat{A}_2(t_2), & \text{при } t_1 > t_2, \\ \hat{A}_2(t_2) \hat{A}_1(t_1), & \text{при } t_1 < t_2. \end{cases} \quad (8.18)$$

Продовжуючи процес обчислення коефіцієнтів у вищих порядках теорії збурення, отримаємо наступний точний вираз

$$c_n(t) = \langle n | P \exp \left(\frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{W}(t') dt' \right) | m \rangle \quad (8.19)$$

де

$$\begin{aligned}
P \exp \left(\frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{W}(t') dt' \right) &\equiv 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{W}(t') dt' + \\
&+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t \tilde{W}(t') \int_0^{t'} \tilde{W}(t'') dt' dt'' + \dots + \\
&+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_0^t \tilde{W}(t') \int_0^{t'} \tilde{W}(t'') \dots \int_0^{t^{(n)}} \tilde{W}(t^{(n)}) dt' dt'' \dots dt^{(n)} + \dots
\end{aligned} \quad (8.20)$$

Для багатьох задач достатньо розглянути тільки декілька перших членів розкладу коефіцієнтів $c_n(t)$. Далі обмежимося

лише розглядом переходів у першому порядку теорії збурень. В цьому випадку ймовірність переходу є

$$w_{nm}^{(1)} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau W_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t} dt \right|^2. \quad (8.21)$$

Далі застосуємо цей результат для описання ряду важливих процесів.

8.2. Переходи під дією збурення, яке змінюється по гармонічному закону

Розберемо важливий випадок, коли оператор збурення змінюється по гармонічному закону:

$$\hat{H}_1 = \hat{W} e^{\pm i\omega t}. \quad (8.22)$$

Тоді на основі формули (8.14) отримаємо для коефіцієнтів $c_n(t)$ в першому порядку теорії збурень

$$c_n^{(1)}(t) = -W_{nm} \frac{\exp[i(\omega_{nm} \pm \omega)t] - 1}{\hbar(\omega_{nm} \pm \omega)}. \quad (8.23)$$

Для ймовірності переходу отримаємо

$$\begin{aligned} w_{nm}^{(1)} &= \frac{|W_{nm}|^2}{\hbar^2} \left| \frac{\exp[i(\omega_{nm} \pm \omega)\tau] - 1}{\omega_{nm} \pm \omega} \right|^2 = \\ &= 4 \frac{|W_{nm}|^2 \sin^2 \left[\frac{1}{2}(\omega_{nm} \pm \omega)\tau \right]}{\hbar^2 (\omega_{nm} \pm \omega)^2}. \end{aligned} \quad (8.24)$$

Тепер зробимо граничний перехід $\tau \rightarrow \infty$. З цією метою знайдемо $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin^2 x\tau}{x^2\tau} \right)$. Почнемо з інтегрального представлення для δ -функції:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau}^{\tau} e^{itx} dt = \frac{1}{\pi} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\sin \tau x}{x}. \quad (8.25)$$

В свою чергу

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin^2 \tau x}{x^2 \tau} \right) &= \lim_{\tau' \rightarrow \infty} \frac{\sin \tau' x}{x \tau'} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\sin \tau x}{x} = \\ &= \lim_{\tau' \rightarrow \infty} \frac{\sin \tau' x}{x \tau'} \pi \delta(x) . \end{aligned} \quad (8.26)$$

Тепер у виразі $\frac{\sin \tau' x}{x \tau'}$ можна покласти, що $x \rightarrow 0$. Тому

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin^2 \tau x}{x^2 \tau} \right) = \lim_{\tau' \rightarrow \infty} \pi \delta(x) = \pi \delta(x) .$$

Таким чином, ймовірність переходу пропорційна часу взаємодії τ :

$$\begin{aligned} w_{nm}^{(1)}(\tau) &= \tau \pi \frac{|W_{nm}|^2}{\hbar^2} \delta \left[\frac{1}{2} (\omega_{nm} \pm \omega) \right] = \\ &= 2\tau \pi \frac{|W_{nm}|^2}{\hbar} \delta(E_n - E_m \pm \hbar \omega) . \end{aligned} \quad (8.27)$$

Далі розглянемо такі переходи, коли кінцевий стан представляє неперервний спектр $E = \hbar \omega$. Тоді доречно говорити про перехід в одиницю часу до станів у інтервалі енергії від E до $E + dE$.

Для того, щоб знайти швидкість таких переходів (ймовірність переходу в одиницю часу), у яких початковий чи кінцевий стан належить неперервному або майже неперервному спектру, необхідно просумувати по всіх кінцевих станах і усереднити по початкових станах. Цим і виправдовується використання δ -функції в (8.27). Якщо позначити густину кінцевих станів на одиницю енергії $\rho(E)$, то повна ймовірність в одиницю часу буде

$$\begin{aligned}
P_{nm} &= \int \frac{W_{nm}}{\tau} \rho(E) dE = \\
&= 2\pi \int \frac{|W_{nm}|^2}{\hbar} \rho(E) \delta(E_n - E_m \pm E) dE = \quad (8.28) \\
&= 2\pi \frac{|W_{nm}|^2}{\hbar} \rho(E_m \mp E),
\end{aligned}$$

де верхній знак відповідає випромінюванню, а нижній – поглинанню кванта енергії $\hbar\omega$.

Якщо кінцевий стан характеризується імпульсом частинки \vec{p} , то

$$\rho(E_{\vec{p}}) dE_{\vec{p}} = d^3 p = pm dE_{\vec{p}} d\Omega, \quad \text{де } p = \sqrt{2mE_{\vec{p}}}. \quad (8.29)$$

Підставляючи (8.29) в (8.28) і інтегруючи по dE_p отримаємо

$$dP_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{nm}|^2 pm d\Omega. \quad (8.30)$$

Величина dP_{nm} має зміст ймовірності переходу за одиницю часу з квантового стану m в стан з імпульсом \vec{p} , модуль якого рівний $p = \sqrt{2m(E_m \mp \hbar\omega)}$, а напрямок лежить в елементі тілесного кута $d\Omega$.

8.3. Ймовірність електромагнітних переходів частинки без спіну

Гамільтоніан частинки без спіну і масою та зарядом m і q , яка взаємодіє із зовнішнім електромагнітним полем, пишемо у вигляді

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{x}) - \frac{q}{2mc} (\hat{\vec{p}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{\vec{p}}) + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (8.31)$$

де \vec{A} - вектор-потенціал. Тут перший член $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{x})$ представляє гамільтоніан частинки при вимкненому електромагнітному полі, а другий член

$$\hat{H}_1 = -\frac{q}{2mc} (\hat{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{p}) + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 \quad (8.32)$$

– гамільтоніан взаємодії частинки з електромагнітним полем. З огляду на те, що скалярний потенціал $\varphi = 0$, умова калібровки Лоренца приведе до $\text{div } \vec{A} = 0$. Тоді робимо висновок, що

$$\hat{H}_1 = -\frac{q}{mc} \vec{A} \cdot \hat{p} + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2. \quad (8.33)$$

Обмежуючись найнижчим порядком теорії збурень, можна відкинути другий член в (8.33)

$$\hat{H}_1 \approx -\frac{q}{mc} \vec{A} \cdot \hat{p}. \quad (8.34)$$

Далі будемо вважати, що електромагнітна хвиля розповсюджується у вигляді плоскої хвилі

$$\vec{A} = \vec{\varepsilon} A \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}), \quad (8.35)$$

де $\vec{\varepsilon}$ - одиничний вектор поляризації. Амплітуду A виберемо так, щоб в об'ємі V було N квантів з енергією $\hbar\omega$

$$A = 2c \sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}}. \quad (8.36)$$

Тоді

$$\hat{H}_1(t) = w e^{i\omega t} + w^* e^{-i\omega t}, \quad (8.37)$$

де “амплітуда” w рівна

$$w = -\frac{q}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) (\vec{\varepsilon} \cdot \hat{p}),$$

$$w^* = -\frac{q}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) (\vec{\varepsilon} \cdot \hat{p}). \quad (8.38)$$

Розглянемо спочатку переходи з випромінюванням кванта світла $\hbar\omega$. Згідно з результатами Розділу 8.2 ця ймовірність в першому порядку нестационарної теорії збурень дається формулою

$$P_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|w|m\rangle|^2 \rho(E_{\text{кін}}), \quad (8.39)$$

де

$$\langle n|w|m\rangle = -\frac{q}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}} \langle n|\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{x})(\vec{\varepsilon}\cdot\hat{\vec{p}})|m\rangle, \quad (8.40)$$

$E_{\text{кін}}$ - енергія фотона, який випромінює квантова система (атом) при переході.

Для оцінки матричного елемента (8.40) будемо вважати, що довжина хвилі світла набагато більша за розміри квантової системи. В цьому випадку можна використовувати *довгохвильове наближення*: експоненту розкласти в ряд

$$\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{x}) \approx 1 - i\vec{k}\cdot\vec{x} + \dots \quad (8.41)$$

і обмежитися першим членом цього розкладу. В результаті для (8.40) отримуємо

$$\langle n|w|m\rangle \approx -\frac{q}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}} \langle n|(\vec{\varepsilon}\cdot\hat{\vec{p}})|m\rangle. \quad (8.42)$$

Щоб обчислити матричний елемент використовуємо тотожність

$$\hat{\vec{p}} = \frac{im}{\hbar} (\hat{H}_0\vec{x} - \vec{x}\hat{H}_0). \quad (8.43)$$

В результаті отримуємо

$$\begin{aligned} \langle n|w|m\rangle &\approx iq \sqrt{\frac{2\pi N}{\hbar\omega V}} (E_m - E_n) \langle n|\vec{x}|m\rangle \cdot \vec{\varepsilon} = \\ &= i \sqrt{\frac{2\pi N}{\hbar\omega V}} (E_m - E_n) \vec{d}_{nm} \cdot \vec{\varepsilon}, \end{aligned} \quad (8.44)$$

де величина $\vec{d}_{nm} = q\langle n|\vec{x}|m\rangle$ є дипольним електричним моментом переходу $m \rightarrow n$, а переходи, обумовленні ненульовим дипольним електричним моментом переходу, називають *дипольними* і позначають $E1$.

Для обчислень ймовірності переходу необхідно просумувати результат (8.39) по кінцевим станам електромагнітного поля. Зробимо це використовуючи так зване нормування в “ящику”. З цією метою знайдемо густину числа станів плоскої хвилі електромагнітного поля з заданою поляризацією в кубі з довжиною ребра $L = \sqrt[3]{V}$. Будемо вимагати, щоб вздовж одного ребра вміщувалось ціле число півхвиль. Тоді хвильовий вектор має задовольняти умові

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L}n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L}n_z. \quad (8.45)$$

Або для імпульсу

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}n_x, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L}n_y, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L}n_z. \quad (8.46)$$

Число станів фотонів у інтервалі енергій між $\hbar\omega$ і $\hbar(\omega + d\omega)$ буде

$$d^3n \equiv dn_x dn_y dn_z = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} p^2 dp d\Omega = \frac{V(\hbar\omega)^2}{(2\pi\hbar c)^3} dE d\Omega, \quad (8.47)$$

де $p = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{E}{c}$. Таким чином для густини станів маємо

$$d\rho = \frac{d^3n}{dE} = \frac{V(\hbar\omega)^2}{(2\pi\hbar c)^3} d\Omega. \quad (8.48)$$

Підставляючи (8.48) в (8.39) отримаємо для ймовірності переходу в одиницю часу в елемент тілесного кута $d\Omega$

$$dP_{nm} = \frac{N\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\vec{d}_{nm} \cdot \vec{\varepsilon}|^2 d\Omega. \quad (8.49)$$

Кінцевий вираз не залежить від розмірів ящика і його можна покласти рівним нескінченності, $L \rightarrow \infty$.

При сумуванні по двом можливим напрямкам поляризації з урахуванням того, що $\vec{k} \cdot \vec{\varepsilon} = 0$, отримуємо:

$$|\vec{d}_{nm} \cdot \vec{\varepsilon}|^2 \rightarrow |\vec{d}_{nm}|^2 \sin^2 \theta, \quad (8.50)$$

де θ - кут між напрямом дипольного моменту \vec{d}_{nm} і хвильовим вектором \vec{k} . Інтегруючи по всьому тілесному куту, одержимо

$$P_{nm} = \frac{4}{3} N \frac{\omega^3 |\vec{d}_{nm}|^2}{\hbar c^3}. \quad (8.51)$$

Для грубої оцінки ймовірності переходу в атомах покладемо, що $|\vec{d}_{nm}| \sim ea$, де a - характерний розмір атома. Тоді для ймовірності (8.51) отримаємо:

$$P_{nm} \sim N \frac{e^2}{\hbar c} \omega \left(\frac{\omega a}{c} \right)^2. \quad (8.52)$$

8.4. Вимушене та спонтанне випромінювання світла

Згідно (8.51), ймовірність випромінювання одного фотона при переході в атомі з рівня m на рівень n пропорційна числу фотонів N падаючої електромагнітної хвилі. Частота і поляризація випромінюваного фотона в точності співпадає з частотою і поляризацією електромагнітної хвилі. Таке випромінювання називається *вимушеним*. Існування такого типу випромінювання було передбачено Ейнштейном ще до створення теорії квантових переходів.

Крім розглянутих переходів ще є переходи з випромінюванням фотона, які обумовлені взаємодією з вакуумними коливаннями. Таке випромінювання називають *спонтанним випромінюванням*, а переходи називають *спонтанними*. Ймовірність спонтанних переходів, виявляється, рівна (8.49) з $N = 1$. Таким чином, повна ймовірність випромінювання фотона в одиницю часу в елемент тілесного кута $d\Omega$ із заданою поляризацією ϵ :

$$dP_{nm}^{\text{вип.}} = \frac{(N+1)\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\vec{d}_{nm} \cdot \vec{\epsilon}|^2 d\Omega. \quad (8.53)$$

Аналогічно можна обчислити ймовірність поглинання фотона в одиницю часу. Для цього потрібно розглянути другий

член взаємодії (8.37). В результаті для поглинання кванта світла, який поширюється всередині тілесного кута $d\Omega$, отримаємо:

$$dP_{nm}^{\text{погл.}} = N \frac{\omega^3 |\vec{d}_{nm} \cdot \vec{\epsilon}|^2}{2\pi\hbar c^3} d\Omega. \quad (8.54)$$

Із формул (8.53) і (8.54) випливає, що ймовірності випромінювання і поглинання зв'язані одна з одною як

$$\frac{dP_{nm}^{\text{вип.}}}{dP_{nm}^{\text{погл.}}} = \frac{N+1}{N}. \quad (8.55)$$

Виявляється, що це відношення приводить до формули Планка для розподілу інтенсивності випромінювання абсолютно чорного тіла.

8.5. Правила відбору для дипольних електромагнітних переходів

Вище було показано, що в довгохвильовому наближенні матричний елемент для поглинання чи випромінювання світла в першому наближенні теорії збурень пропорційний скалярному добутку поляризації фотона на матричний елемент дипольного переходу, див. (8.44). Обчислимо цей скалярний добуток для переходів квантової частинки, що знаходиться в центрально-симетричному полі. Відповідні хвильові функції початкового і кінцевого стану будуть характеризуватися моментом кількості руху і його проєкцій на вісь z , тобто в якості початкового і кінцевого станів вибираються

$$|l, m\rangle = \frac{1}{r} R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (8.56)$$

$$|l', m'\rangle = \frac{1}{r} R'(r) Y_{l'm'}(\theta, \varphi), \quad (8.57)$$

де $R(r)$ і $R'(r)$ - радіальні функції, явний вигляд яких надалі буде неважливим.

Розглянемо випадок, коли фотон поляризований лінійно. При цьому виберемо систему координат так, щоб вісь z системи координат була направлена вздовж вектора поляризації

$$\vec{\varepsilon}^{(0)} = (0,0,1) \quad \text{і} \quad \vec{\varepsilon}^{(0)} \cdot \vec{r} = r \cos \theta. \quad (8.58)$$

Матричний елемент оператора (8.58) рівний

$$\begin{aligned} \langle l', m' | \vec{\varepsilon}^{(0)} \cdot \vec{r} | l, m \rangle &= \int_0^\infty dr r R'(r) R(r) \times \\ &\times \int d\varphi \int d\theta \sin \theta \cos \theta Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (8.59)$$

Такий інтеграл вже розглядався при обговоренні ефекта Штарка (див. формули (7.68) та (7.69)), де було показано, що інтеграл (8.59) відмінний від нуля при умові

$$m = m' \quad \text{і} \quad l' = l \pm 1. \quad (8.60)$$

Тепер розглянемо фотони, які мають кругову поляризацію. Систему координат виберемо так, щоб вісь z була перпендикулярна до площини поляризації. В цьому випадку маємо такі два вектори поляризації

$$\vec{\varepsilon}^{(\pm)} = \sqrt{\frac{1}{2}} (1, \pm i, 0), \quad (8.61)$$

що відповідають правій та лівій круговим поляризаціям. Тоді

$$\vec{\varepsilon}^{(\pm)} \cdot \vec{r} = \sqrt{\frac{1}{2}} r \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad (8.62)$$

і частина матричного елемента (8.44), що відповідає кутовим змінним, буде:

$$\begin{aligned} &\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin^2 \theta e^{\pm i\varphi} Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \\ &= \int_0^{2\pi} \exp\{i(m - m' \pm 1)\varphi\} d\varphi \int_{-1}^1 dz \sqrt{1-z^2} P_l^m(z) P_{l'}^{m'}(z) = \\ &= 2\pi \delta_{m, m' \pm 1} \int_{-1}^1 dz \sqrt{1-z^2} P_l^{m \pm 1}(z) P_{l'}^{m'}(z). \end{aligned} \quad (8.63)$$

Використовуючи (Д.9) отримуємо, що для фотона з круговою поляризацією матричний елемент

$$\langle l', m' | \vec{\varepsilon}^{(\pm)} \cdot \vec{r} | l, m \rangle = \delta_{m, m' \pm 1} (A \delta_{l, l-1} + B \delta_{l, l+1}), \quad (8.64)$$

де A і B – деякі коефіцієнти, явний вид яких зараз не потрібний. Комбінуючи цей результат з результатом (8.60), заключаємо, що дипольні переходи можливі, якщо виконуються наступні умови:

$$\Delta m = 0, \pm 1 \quad \text{і} \quad \Delta l = \pm 1. \quad (8.65)$$

Ці умови називаються правилами відбору для дипольних переходів. Їх ще називають $E1$ -переходами.

8.6. Квадрупольні та магнітні переходи

Правила відбору (8.65) не є абсолютними. Вони тільки говорять, що якщо ці умови не виконуються, то неможливі дипольні переходи, тобто переходи відбуваються за рахунок вищих членів розкладу (8.41). Ймовірність таких переходів у атомах значно менша, ніж імовірність $E1$ -переходів.

Розглянемо в якості прикладу другий член розкладу (8.41). В цьому випадку матричний елемент (8.40) буде пропорційний

$$\langle l', m' | (\vec{k} \cdot \vec{x}) (\vec{\varepsilon} \cdot \hat{p}) | l, m \rangle. \quad (8.66)$$

В загальному випадку

$$(\vec{k} \cdot \vec{x}) (\vec{\varepsilon} \cdot \hat{p}) = \frac{\hbar}{i} \sum_{i,j=1}^3 M_{ij} x_i \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad (8.67)$$

причому завдяки поперечності світлової хвилі $\sum_{i=1}^3 M_{ii} = 0$. В свою

чергу, тензорний оператор $\frac{\hbar}{i} x_i \frac{\partial}{\partial x_j}$ можна розписати через

симетричний і антисиметричний тензорні оператори:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} x_i \frac{\partial}{\partial x_j} &= \frac{\hbar}{2i} \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_j} + x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + \frac{\hbar}{2i} \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \right) = \\ &= \frac{\hbar}{2i} \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_j} + x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k. \end{aligned} \quad (8.68)$$

Далі легко отримати операторну рівність

$$x_i \frac{\partial}{\partial x_j} + x_j \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{m}{\hbar^2} (x_i x_j \hat{H}_0 - \hat{H}_0 x_i x_j) - \delta_{ij}. \quad (8.69)$$

В результаті отримаємо, що матричні елементи (8.66) виражаються через матричні елементи двох типів

$$\langle l', m' | xy | l, m \rangle, \quad \langle l', m' | xz | l, m \rangle, \quad \langle l', m' | yz | l, m \rangle \quad (8.70)$$

$$\langle l', m' | \hat{l}_x | l, m \rangle, \quad \langle l', m' | \hat{l}_y | l, m \rangle, \quad \langle l', m' | \hat{l}_z | l, m \rangle. \quad (8.71)$$

Перші переходи називають *квадрупольними електричними переходами* і позначають $E2$. Переходи типу (8.71) називають *магнітними дипольними переходами* і позначають $M1$.

Розглянемо більш детально переходи $M1$. При $(l', m') \neq (l, m)$ матричний елемент

$$\langle l', m' | \hat{l}_z | l, m \rangle = \hbar m \langle l', m' | l, m \rangle = 0. \quad (8.72)$$

Тому ненульові матричні елементи переходів $M1$ будуть тільки від операторів \hat{l}_x і \hat{l}_y . Переписуючи ці оператори через \hat{l}_\pm і користуючись їх властивостями (3.13) приходимо до висновку, що:

$$\begin{aligned} \langle l', m' | \hat{l}_x | l, m \rangle &= \frac{1}{2} \langle l', m' | \hat{l}_+ + \hat{l}_- | l, m \rangle = \\ &= a_1 \langle l', m' | l, m+1 \rangle + a_2 \langle l', m' | l, m-1 \rangle = \\ &= \delta_{l'l'} (a_1 \delta_{m', m'+1} + a_2 \delta_{m', m'-1}), \end{aligned} \quad (8.73)$$

$$\begin{aligned} \langle l', m' | \hat{l}_y | l, m \rangle &= \frac{1}{2i} \langle l', m' | \hat{l}_+ - \hat{l}_- | l, m \rangle = \\ &= b_1 \langle l', m' | l, m+1 \rangle + b_2 \langle l', m' | l, m-1 \rangle = \\ &= \delta_{l'l'} (b_1 \delta_{m', m'+1} + b_2 \delta_{m', m'-1}) \end{aligned} \quad (8.74)$$

і правила відбору для $M1$ переходів такі:

$$l' = l \quad \text{і} \quad m' = m \pm 1. \quad (8.75)$$

Для частинки в центрально-симетричному полі стани $|l, m\rangle$ і $|l, m'\rangle$ вироджені. Тому переходи між ними не можуть бути зв'язані з поглинанням чи випромінюванням енергії. Такого роду переходи можуть виникати, коли атом знаходиться в зовнішньому

магнітному полі і переходи відбуваються між сусідніми зсемановськими рівнями.

Інші члени розкладу дають переходи більш високої мультипольності EJ і MJ . В загальному випадку можна показати, що в електричних переходах EJ парність змінюється на величину $(-1)^j$. Для магнітних переходів MJ парність змінюється на величину $(-1)^{j+1}$.

8.7. Час життя збудженого стану

Явище спонтанного переходу квантової системи із збудженого рівня енергії на більш низький означає, що збуджені стани, строго кажучи, не є стаціонарними; вони мають кінцевий час життя τ і їх потрібно розглядати як квазістаціонарні.

Час життя квантової системи в стані $|n\rangle$ визначають як середній час τ , на протязі якого ймовірність відшукати систему в цьому квантовому стані зменшиться в e разів.

Згідно з принципом невизначеності енергія квазістаціонарних станів не фіксована. Тому для того, щоб побудувати хвильову функцію квазістабільного стану слід виходити з загального розв'язку рівняння Шрьодінгера

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{x}) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \quad (8.76)$$

із спеціальним вибором коефіцієнтів c_n . Звичайно, у випадку неперервного спектру сума в формулі (8.76) замінюється на інтеграл по неперервній змінній:

$$\sum_n \rightarrow \int d\eta. \quad (8.77)$$

Як вже підкреслювалось раніше, квантовий стан (8.76) не має певного значення енергії. Можна лише говорити про її середнє значення

$$\langle E \rangle \equiv \int d^3x \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{H} \Psi(\vec{x}, t) = \quad (8.78)$$

$$= \sum_{n'} \sum_n c_n^* c_n E_n \exp \left[-i \frac{(E_n - E_{n'}) t}{\hbar} \right] \int d^3 x \psi_{n'}^*(\vec{x}) \psi_n(\vec{x}).$$

Використовуючи умову ортонормування хвильових функцій

$$\int d^3 x \psi_{n'}^*(\vec{x}) \psi_n(\vec{x}) = \delta_{nn'} \quad (8.79)$$

отримаємо

$$\langle E \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n. \quad (8.80)$$

У випадку неперервного спектру замість цієї умови потрібно написати

$$\int d^3 x \psi_{\eta'}^*(\vec{x}) \psi_{\eta}(\vec{x}) = \delta(\eta - \eta') \quad (8.81)$$

і тоді (8.80) заміниться на

$$\langle E \rangle = \int d\eta |c(\eta)|^2 E_{\eta}. \quad (8.82)$$

Розглянемо випадок, коли спектр E_{η} неперервний і коефіцієнти можна розглядати просто як функцію енергії $c(E) \equiv c_{\eta}$. Очевидно, що величина $|c(E)|^2 dE$ рівна ймовірності того, що квантова система знаходиться в стані, енергія якого лежить в енергетичному інтервалі від E до $E + dE$.

Виявляється, що у багатьох випадках для величин $|c(E)|^2$ можна використати розподіл Лоренца

$$|c(E)|^2 = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\Gamma}{(E - E_0)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}. \quad (8.83)$$

Розподіл (8.83) нормований як

$$\int dE |c(E)|^2 = 1. \quad (8.84)$$

Очевидно, що E_0 представляє максимум розподілу енергії квазістабільного стану, а параметр Γ показує, при якому відхиленні енергії E від E_0 густина ймовірності зменшується у два рази. Цей параметр називають *шириною стану*.

Тепер знайдемо закон розпаду, тобто ймовірність $W(t)$ того, що в момент часу t система знаходиться в тому ж квантовому стані, в якому вона знаходилась в початковий момент $t = 0$.

Запишемо хвильову функцію системи в початковий момент часу

$$\Psi(\vec{x}, 0) = \int dE c(E) \psi_E(\vec{x}). \quad (8.85)$$

В любий наступний момент часу $t > 0$ хвильова функція є

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int dE c(E) \psi_E(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar} E t}. \quad (8.86)$$

Інтеграл перекриття між цими станами

$$\begin{aligned} A(t) &= \int d^3x \Psi^*(\vec{x}, 0) \Psi(\vec{x}, t) = \\ &= \int dE \int dE' c^*(E') c(E) e^{\frac{i}{\hbar} E t} \int d^3x \psi_{E'}^*(\vec{x}) \psi_E(\vec{x}) = \\ &= \int dE \int dE' \delta(E - E') c^*(E') c(E) e^{\frac{i}{\hbar} E t} = \\ &= \int dE |c(E)|^2 e^{\frac{i}{\hbar} E t} \end{aligned} \quad (8.87)$$

має зміст амплітуди ймовірності знаходження квантової системи в момент часу t в стані $\Psi(\vec{x}, 0)$. Підставляючи в (8.87) розподіл Лоренца і беручи інтеграл по dE за допомогою теореми Коші (див. Додаток до цього Розділу) одержимо для амплітуди ймовірності

$$A(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(E_0 - \frac{i}{2}\Gamma\right)t\right]. \quad (8.88)$$

Відповідно ймовірність $W(t)$ рівна

$$W(t) = |A(t)|^2 = \exp(-\Gamma t/\hbar). \quad (8.89)$$

Очевидно, що фізичний зміст величини

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (8.90)$$

це час життя квазістабільного рівня.

Чисто формально квазістаціонарний стан можна розглядати як стан з комплексною енергією E , дійсна частина якої дорівнює E_0 , а уявна частина визначається шириною стану

$$E = E_0 - \frac{i}{2} \Gamma.$$

При цьому хвильова функція записується в вигляді

$$\Psi_0(\vec{x}, t) = \psi_0(\vec{x}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(E_0 - \frac{i}{2}\Gamma\right)t\right]. \quad (8.91)$$

В результаті ймовірність виявити цей стан в момент часу t буде спадати по закону (8.89):

$$W(t) = \int d^3x |\Psi_0(\vec{x}, t)|^2 = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \quad (8.92)$$

Тепер перейдемо до випадку, коли спектр дискретний. Для простоти обмежимося розглядом системи, що представляє суперпозицію двох енергетичних станів E_1 і E_2 ($E_1 \neq E_2$), яким відповідають хвильові функції $\psi_1(\vec{x})$ і $\psi_2(\vec{x})$:

$$\Psi(\vec{x}, t) = c_1 e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_1(\vec{x}) + c_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \psi_2(\vec{x}),$$

де $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.

Ймовірність того, що в момент часу t система знаходиться в тому ж квантовому стані, в якому вона знаходилась в момент часу $t = 0$, розраховується аналогічно тому, як це було зроблено для неперервного спектру. А саме обчислемо інтеграл перекриття

$$A(t) = \int \Psi^*(\vec{x}, 0) \Psi(\vec{x}, t) d^3x = |c_1|^2 e^{-iE_1 t/\hbar} + |c_2|^2 c_2^2 e^{-iE_2 t/\hbar}$$

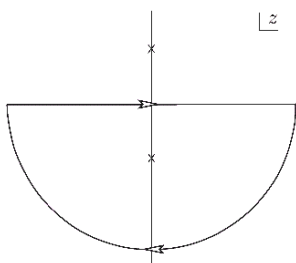
і ймовірність знайдемо як квадрат модуля інтегралу перекриття:

$$\begin{aligned} W(t) &= \left| |c_1|^2 e^{-iE_1 t/\hbar} + |c_2|^2 e^{-iE_2 t/\hbar} \right|^2 = \\ &= |c_1|^4 + |c_2|^4 + 2|c_1|^2 |c_2|^2 \cos\left(\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (8.93)$$

Таким чином ймовірність осцилює з періодом $T = \frac{\hbar}{2\pi |\Delta E|}$ між максимальним та мінімальним значеннями 1 і $(|c_1|^2 - |c_2|^2)^2$.

Додаток: обчислення інтегралу (8.87)

Інтеграл, який потрібно взяти, має такий вигляд



$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{-iaz}}{z^2 + k^2}, \text{ де } \alpha > 0.$$

Розглянемо підінтегральний вираз як функцію комплексної змінної z . Вона має два полюси в точках $z = \pm ik$ (Рис. 14).

Рис. 14. Контур інтегрування у виразі (8.94).

Якщо замкнути область інтегрування по півкругу нескінченного радіуса в нижній півплощині, то із-за експоненціально спадаючого множника інтеграл по півкругу

дасть нуль. Тому інтеграл можна замінити на інтеграл по контуру, зображеному на Рис. 14

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{-iaz}}{z^2 + k^2} = \oint dz \frac{e^{-iaz}}{z^2 + k^2}. \quad (8.94)$$

Контур інтегрування охоплює нижній полюс і тому можна використати формулу Коші, в результаті чого отримаємо

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{-iaz}}{z^2 + k^2} = \frac{\pi}{k} e^{-\alpha k}.$$

Задачі

8.1. Лінійний гармонічний осцилятор знаходиться у зовнішньому електричному полі $\vec{E}(t)$, яке направлено вздовж коливань осцилятора. Знайти у першому порядку теорії збурень

ймовірності збудження стану m в момент часу $t \rightarrow \infty$. Вважати, що осцилятор знаходився у стані n в момент включення поля при $t \rightarrow -\infty$. Розглянути випадок, коли $\vec{E}(t) = \vec{E} e^{-(t/t_0)^2}$.

8.2. Одержати аналог формули (8.93) для випадку, коли квантові стани $\psi_1(\vec{x})$ і $\psi_2(\vec{x})$ мають скінчений час життя, τ_1 та τ_2 .

РОЗДІЛ 9. СИСТЕМИ БАГАТЬОХ ЧАСТИНОК

9.1. Система тотожних частинок. Зв'язок спіна із статистикою

З досліду відомо, що мікрочастинки одного роду (електрони, протони нейтрони, тощо) тотожні, тобто мають однакові маси, заряди та інші фізичні властивості. В класичній механіці тотожність частинок не приводить до якихось особливостей щодо їх опису. Дійсно, тотожні частинки, принаймні в принципі, можна пронумерувати і прослідкувати за їх рухом, а тому їх опис буде таким самим, як і для нетотожних частинок.

Інша справа виникає в квантовій механіці. Тут пропадає поняття траєкторії руху частинки і тому прослідкувати за рухом окремих частинок неможливо. Ця обставина приводить до одного з фундаментальних принципів квантової механіки, який стверджує, що частинки одного роду в принципі неможливо розрізнити між собою (*принципом нерозрізнювальності частинок*). В свою чергу, з цього принципу випливає важливий наслідок щодо властивостей хвильової функції системи тотожних частинок.

Для простоти розглянемо хвильову функцію двох тотожних частинок $\psi(1,2)$. Величина

$$dW(1,2) = |\psi(1,2)|^2 d^3x_1 d^3x_2,$$

представляє ймовірність знайти частинку 1 в об'ємі d^3x_1 в околі точки \vec{x}_1 , одночасно з частинкою 2 в об'ємі d^3x_2 в околі точки \vec{x}_2 . В зв'язку з тим, що розрізнити частинки неможливо, ця ймовірність не зміниться, якщо частинки поміняти місцями:

$$dW(1,2) = dW(2,1),$$

або

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2.$$

Це, в свою чергу, означає, що

$$\psi(2,1) = e^{i\varphi} \psi(1,2).$$

Тепер зробимо ще одну перестановку частинок:

$$\psi(1,2) = e^{2i\varphi} \psi(1,2).$$

Звідси випливає, що

$$\psi(2,1) = \pm\psi(1,2)$$

і система тотожних частинок може знаходитися в одному з двох станів – повністю симетричному, чи повністю антисиметричному відносно перестановок частинок. Якщо система тотожних частинок описується симетричною хвильовою функцією, то такі частинки називають *бозонами*. Якщо ж вона описується антисиметричною хвильовою функцією, то відповідні частинки називають *ферміонами*.

Відповідно до перестановочної симетрії хвильової функції існує дві статистики – статистика Бозе-Ейнштейна та статистика Фермі-Дірака. При цьому вибір типу симетрії визначається спіном частинок (*зв'язок спіну із статистикою*). Бозонами є частинки зі спіном, рівним цілому числу \hbar , а ферміонами – півцілому числу \hbar .

Якщо взаємодія між тотожними частинками не залежить явно від спіну, то на перший погляд здається, що розв'язок рівняння Шрьодінгера для системи тотожних частинок не повинен залежати від спіну. Проте це не так. Справа в тому, що на хвильову функцію системи тотожних частинок необхідно накласти додаткову умову відносно перестановочної симетрії. Зокрема відмітимо, що саме внаслідок симетрії відносно перестановки електронів виникає різниця енергій для ортогоелію і парагелію. Більш докладно обговоримо це трохи пізніше в цьому Розділі. Існують також інші важливі ефекти, пов'язані з перестановочною симетрією у системі тотожних частинок.

Зараз дамо відповідь на питання, які обмеження накладає принцип зв'язок спіна із статистикою на просторову частину хвильової функції бозонів і ферміонів. Як найпростішу задачу розглянемо систему з двох тотожних частинок 1 і 2. Розв'язок відповідного рівняння Шрьодінгера позначимо $\psi(1,2)$. В силу тотожності частинок хвильова функція $\psi(2,1)$, яку отримуємо з $\psi(1,2)$ шляхом перестановки частинок, теж буде розв'язком того ж рівняння Шрьодінгера. Побудуємо з цих двох функцій симетричну і антисиметричну хвильові функції

$$\psi_{\text{сим.}} = \sqrt{\frac{1}{2}} [\psi(1,2) + \psi(2,1)], \quad (9.1)$$

$$\psi_{\text{а.с.}} = \sqrt{\frac{1}{2}} [\psi(1,2) - \psi(2,1)]. \quad (9.2)$$

З огляду на те, що гамільтоніан не залежить від спіну, спінові і просторові змінні (координати) розділяються в $\psi_{\text{сим.}}$ і $\psi_{\text{а.с.}}$:

$$\psi_{\text{сим.}}(s_1, s_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \chi(s_1, s_2), \quad (9.3)$$

$$\psi_{\text{а.с.}}(s_1, s_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \tilde{\Phi}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \tilde{\chi}(s_1, s_2), \quad (9.4)$$

де Φ і $\tilde{\Phi}$ - орбітальні, а χ і $\tilde{\chi}$ - спінові хвильові функції системи. Розглянемо тепер можливі типи симетрій функцій Φ , $\tilde{\Phi}$, χ і $\tilde{\chi}$. Кожна з них може мати один з двох типів симетрії – симетричний або антисиметричний тип

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{сим.}}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \Phi_{\text{сим.}}(\vec{x}_2, \vec{x}_1), & \chi_{\text{сим.}}(s_1, s_2) &= \chi_{\text{сим.}}(s_2, s_1), \\ \Phi_{\text{а.с.}}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= -\Phi_{\text{а.с.}}(\vec{x}_2, \vec{x}_1), & \chi_{\text{а.с.}}(s_1, s_2) &= -\chi_{\text{а.с.}}(s_2, s_1) \end{aligned} \quad (9.5)$$

і аналогічно для $\tilde{\Phi}$ і $\tilde{\chi}$. Тоді, щоб забезпечити відповідну симетрію хвильових функцій ψ , необхідно вибрати тільки такі комбінації

$$\psi_{\text{сим.}} = \Phi_{\text{сим.}} \chi_{\text{сим.}}, \quad \psi_{\text{сим.}} = \Phi_{\text{а.с.}} \chi_{\text{а.с.}}, \quad (9.6)$$

$$\psi_{\text{а.с.}} = \tilde{\Phi}_{\text{а.с.}} \tilde{\chi}_{\text{сим.}}, \quad \psi_{\text{а.с.}} = \tilde{\Phi}_{\text{сим.}} \tilde{\chi}_{\text{а.с.}}. \quad (9.7)$$

В загальному випадку коли маємо n частинок, симетричну і антисиметричну хвильові функції отримують шляхом сумування по всім можливим перестановкам частинок P :

$$\psi_{\text{сим.}} = \sqrt{\frac{1}{n!}} \sum_P \hat{P} \psi(1, 2, \dots, n), \quad (9.8)$$

$$\psi_{\text{а.с.}} = \sqrt{\frac{1}{n!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} \psi(1, 2, \dots, n), \quad (9.9)$$

де $(-1)^P = \pm 1$ - парність перестановки. В хвильових функціях (9.8) і (9.9) знову можна розділити спінові і орбітальні змінні

$$\psi_{\text{сим.}} = \sum_{\nu} \Phi_{\nu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \chi_{\nu}(s_1, s_2, \dots, s_n), \quad (9.10)$$

$$\psi_{\text{а.с.}} = \sum_{\nu} \tilde{\Phi}_{\nu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \tilde{\chi}_{\nu}(s_1, s_2, \dots, s_n). \quad (9.11)$$

При цьому хвильові функції для орбітального руху $\Phi_{\nu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$ і $\tilde{\Phi}_{\nu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$, спінові функції $\chi_{\nu}(s_1, s_2, \dots, s_n)$ і $\tilde{\chi}_{\nu}(s_1, s_2, \dots, s_n)$ можуть, в загальному випадку, бути не лише симетричними і антисиметричними, але і зі змішаною симетрією. Зараз опишемо спосіб отримання всіх можливих типів симетрії відносно перестановки частинок для функції $\varphi(1, 2, \dots, n)$, де значки $1, 2, \dots, n$ позначають набір якихось змінних (координати, спінові і т.д.), що характеризують 1-у, 2-у і т.д. частинки.

9.2. Схеми Юнга

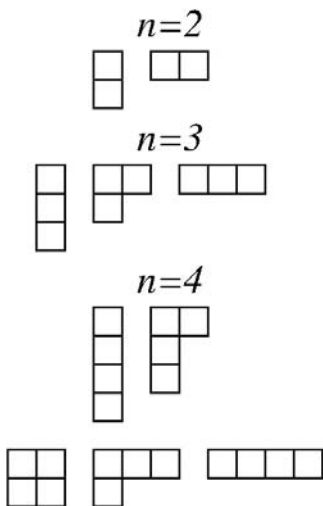


Рис. 15. Схеми Юнга для двох, трьох та чотирьох частинок.

Можливі типи симетрій зручно описувати за допомогою схем Юнга. З цією метою розіб'ємо набір змінних $\{1, 2, \dots, n\}$ на ряд піднаборів, що містять n_1, n_2, \dots, n_k змінних, причому $n_1 + n_2 + \dots + n_k = n$. Кожному з таких піднаборів поставимо у відповідність рядок з n_k клітинок і розташуємо останні так, щоб у кожному рядку було не менше клітинок, ніж в наступному. В результаті виходить схема Юнга, яка дає можливість наглядно побачити можливі типи симетрії функції $\varphi(1, 2, \dots, n)$. На Рис. 15 приведені

всі схеми Юнга для випадків $n = 2, 3$ і 4 . Часто схему Юнга записують просто як набір чисел всіх її рядків в квадратних дужках. Наприклад, схеми $n = 2$ (перший рядок) запишуться в таких позначеннях $[11]$ і $[2]$. Схеми з $n = 3$ запишуться як $[111]$, $[21]$ і $[3]$.

Тепер кожен змінну функції $\varphi(1, 2, \dots, n)$ помістимо в одну з клітинок схеми Юнга. Потім по всіх змінних, які входять в один рядок, проведемо симетризацію. Після цього по всіх змінних, які входять в один стовпчик, проведемо антисиметризацію. В результаті отримаємо нову хвильову функцію, в загальному випадку зі змішаною симетрією.

Розглянемо декілька прикладів. Почнемо з двох частинок, $n = 2$. В цьому випадку маємо дві схеми Юнга $[11]$ і $[2]$. Їм відповідають функції

$$\begin{aligned}\varphi_{[11]}(1, 2) &= \sqrt{\frac{1}{2}} [\varphi(1, 2) - \varphi(2, 1)], \\ \varphi_{[2]}(1, 2) &= \sqrt{\frac{1}{2}} [\varphi(1, 2) + \varphi(2, 1)].\end{aligned}\tag{9.12}$$

При цьому спінова функція для частинок зі спіном $s = 1/2$ із певною симетрією відповідає системі з певним значенням повного спіну S . Так спінова функція $\varphi_{[11]}(1, 2)$ відповідає значенню $S = 0$, а $\varphi_{[2]}(1, 2)$ - спінові $S = 1$.

Для трьох частинок маємо антисиметричну та симетричну функції

$$\begin{aligned}\varphi_{[111]}(1, 2, 3) &= \sqrt{\frac{1}{6}} [\varphi(1, 2, 3) - \varphi(2, 1, 3) - \varphi(1, 3, 2) - \\ &\quad - \varphi(3, 2, 1) + \varphi(2, 3, 1) + \varphi(3, 1, 2)],\end{aligned}\tag{9.13}$$

$$\begin{aligned}\varphi_{[3]}(1, 2, 3) &= \sqrt{\frac{1}{6}} [\varphi(1, 2, 3) + \varphi(2, 1, 3) + \varphi(1, 3, 2) + \\ &\quad + \varphi(3, 2, 1) + \varphi(2, 3, 1) + \varphi(3, 1, 2)],\end{aligned}\tag{9.14}$$

а також дві функції із змішаною симетрією $\varphi_{[21]}(1,2,3)$.

Відмітимо, що для спінової функції частинок зі спіном $s = 1/2$ спінові функції, що відповідають схемам Юнга з числом рядків більше ніж 2, неприпустимі. Дійсно в такому випадку завжди знайдеться стовпчик, що містить більш ніж два квадратики. Але спінова змінна має тільки два значення, що відповідають випадкам, коли спін напрямлений вгору (+) або вниз (-). Як наслідок, в такому стовпчику виявиться принаймні два однакові значення змінної, антисиметризація по яких дасть нульову функцію. Наприклад, якщо розглянути функцію (9.13), яка відповідає схемі, що містить всього один стовпчик з трьох квадратів, то отримаємо нульовий результат

$$\begin{aligned} \varphi_{[111]}(++-) = \sqrt{\frac{1}{6}} & [\varphi(++-)-\varphi(++-)-\varphi(+--+)- \\ & -\varphi(-++)+\varphi(+--+)+\varphi(-++)] = 0. \end{aligned} \quad (9.15)$$

Повністю симетрична спінова функція $\varphi_{[3]}(1,2,3)$ для частинок із спіном $s = 1/2$ відповідає значенню повного спіну $S = 3/2$, а спінова функція зі змішаною симетрією $\varphi_{[21]}(1,2,3) - S = 1/2$.

В багатьох задачах гамільтоніан системи частинок можна представити у вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}, \quad (9.16)$$

де \hat{H}_0 представляє собою суму гамільтоніанів для однієї частинки в зовнішньому полі

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^n \hat{H}_i, \quad (9.17)$$

а \hat{W} - поправка, яку можна врахувати за допомогою теорії збурень. В цьому випадку базисними хвильовими функціями, на яких базується теорія збурень, будуть функції, складені з добутку функцій $\varphi_{N_i}(i)$, де i - набір змінних, якими описується дана

частинка, а N_i – номер частинки. Відповідно, симетричну функцію можна записати як

$$\psi_{\text{сим.}} = \sqrt{\frac{1}{n!}} \sum_P \hat{P} \varphi_{N_2}(1) \varphi_{N_2}(2) \dots \varphi_{N_n}(n), \quad (9.18)$$

де оператор перестановки \hat{P} переставляє аргументи у відповідних одночасткових функцій:

$$\begin{aligned} & \hat{P} \varphi_{N_1}(1) \dots \varphi_{N_i}(i) \dots \varphi_{N_n}(n) = \\ & = \varphi_{N_1}(P(1)) \dots \varphi_{N_i}(P(i)) \dots \varphi_{N_n}(P(n)). \end{aligned} \quad (9.19)$$

Для антисиметричної функції зручно використовувати запис у вигляді детермінанта

$$\psi_{\text{a.c.}} = \sqrt{\frac{1}{n!}} \begin{vmatrix} \varphi_{N_1}(1) & \varphi_{N_1}(2) & \dots & \varphi_{N_1}(n) \\ \varphi_{N_2}(1) & \varphi_{N_2}(2) & \dots & \varphi_{N_2}(n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{N_n}(1) & \varphi_{N_n}(2) & \dots & \varphi_{N_n}(n) \end{vmatrix}. \quad (9.20)$$

Із властивостей детермінанта випливає, що якщо один зі станів N_1, N_2, \dots, N_n буде зустрічатися двічі, то хвильова функція (9.20) перетвориться на нуль. Це означає, що

два ферміона не можуть знаходитись у одному стані.

Це твердження називають *принципом Паулі*.

9.3. Розрахунок енергії атома з багатьма електронами методом Хартрі-Фока

Як і раніше, будемо нехтувати спіно-орбітальною взаємодією. Гамільтоніан атома в цьому випадку є

$$\hat{H} = \sum_{i=1} \hat{H}_i + \sum_{i < j} V_{ij}, \quad (9.21)$$

де \hat{H}_i - гамільтоніан одного електрона в полі ядра

$$\hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i}, \quad (9.22)$$

а

$$V_{ij} = \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \quad (9.23)$$

енергія кулонівського відштовхування двох електронів.

Один з методів для опису таких систем був запропонований Хартрі і потім вдосконалений Фоком. Цей метод оснований на варіаційному принципі Рітца і носить назву *метода Хартрі-Фока*.

Як уже підкреслювалося раніше, успіх розрахунку методом Рітца залежить від вдалого вибору пробної функції. У даному випадку пробну функцію будують у вигляді добутку хвильових функцій окремих електронів $\varphi_i(\vec{r}_i)$, а варіаційними “параметрами” вважаються самі одночастинкові функції $\varphi_i(\vec{r}_i)$. Отже, далі задача полягає в тому, щоб на основі гамільтоніана (9.21) знайти рівняння для $\varphi_i(\vec{r}_i)$.

9.3.1. Самоузгоджене поле. Метод Хартрі

В розрахунках *методом Хартрі* нехтується ефектами, пов’язаними з перестановочною симетрією хвильової функції і тому в якості пробної функції використовують наступну функцію

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z) = \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \dots \varphi_Z(\vec{r}_Z). \quad (9.24)$$

Згідно з варіаційним методом Рітца складемо функціонал очікуваного значення енергії по хвильовій функції (9.24)

$$\begin{aligned} \bar{E}[\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_Z] &= \sum_{i=1}^Z \int d^3r_i \varphi_i^*(\vec{r}_i) \hat{H}_i \varphi_i(\vec{r}_i) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int d^3r_i d^3r_j \varphi_i^*(\vec{r}_i) \varphi_j^*(\vec{r}_j) V_{ij} \varphi_i(\vec{r}_i) \varphi_j(\vec{r}_j). \end{aligned} \quad (9.25)$$

Однак безпосередньо до цього функціонала не можна застосувати варіаційний принцип. Справа в тому, що варіації функцій $\varphi_i(\vec{r}_i)$ не можна вважати незалежними, так як функції $\varphi_i(\vec{r}_i)$ мають бути нормованими

$$\int d^3 r_i |\varphi_i(\vec{r}_i)|^2 = 1 \quad (9.26)$$

і тому на варіації необхідно накласти зв'язки

$$\int d^3 r_i \delta\varphi_i^*(\vec{r}_i) \varphi_i(\vec{r}_i) = 0. \quad (9.27)$$

При варіюванні функцій зі зв'язками використовують метод множників Лагранжа. В результаті варіації по $\delta\varphi_i^*$ отримаємо

$$\sum_{i=1}^Z \int d^3 r_i \delta\varphi_i^*(\vec{r}_i) \left[\hat{H}_i + \sum_{i \neq j} \int d^3 r_j \varphi_j^*(\vec{r}_j) V_{ij}(r_{ij}) \varphi_j(\vec{r}_j) - \varepsilon_i \right] \varphi_i(\vec{r}_i) = 0, \quad (9.28)$$

де ε_i – множники Лагранжа. В (9.28) варіації $\delta\varphi_i^*$ вважаються незалежними змінними і тому слід прирівняти до нуля величину

$$\left[\hat{H}_i + \sum_{i \neq j} \int d^3 r_j \varphi_j^*(\vec{r}_j) V_{ij}(r_{ij}) \varphi_j(\vec{r}_j) - \varepsilon_i \right] \varphi_i(\vec{r}_i) = 0. \quad (9.29)$$

Далі, якщо розглядати величину

$$U(r_i) = \sum_{i \neq j} \int d^3 r_j \varphi_j^*(\vec{r}_j) V_{ij}(r_{ij}) \varphi_j(\vec{r}_j) \quad (9.30)$$

як потенціал, а ε_i як енергію i -го електрона, то рівняння (9.29) слід розглядати як рівняння Шрьодінгера для електрона, що знаходиться в полі ядра, яке частково екрановане за рахунок інших електронів.

З іншої сторони, потенціал $U(r_i)$, який визначає одночастинкові хвильові функції електронів, згідно (9.30) виражається через ці ж самі хвильові функції. Тому цей потенціал називають *самоузгодженим потенціалом*.

Одержані рівняння (9.29) з потенціалом (9.30) представляють собою систему із Z інтегро-диференціальних рівнянь. З математичної точки зору знаходження точного розв'язку такої системи представляє практично нерозв'язну задачу. Проте виявляється, що вона може бути розв'язана наближено на основі метода послідовних наближень. З цією метою в якості нульового наближення $\varphi_i^{(0)}(\vec{r}_i)$ використовують хвильові функції

відповідного воднеподібного атома. З їх допомогою знаходять самоузгоджений потенціал в першому наближенні:

$$U^{(1)}(r_i) = \sum_{j \neq i} \int d^3 r_j \varphi_j^{(0)*}(\vec{r}_j) V_{ij}(r_{ij}) \varphi_j^{(0)}(\vec{r}_j). \quad (9.31)$$

Підставляючи в якості самоузгодженого потенціалу цей вираз в (9.29) знаходять з рівняння Шрьодінгера

$$\left[\hat{H}_i + U^{(1)}(r_i) - \varepsilon_i^{(1)} \right] \varphi_i^{(1)}(\vec{r}_i) = 0 \quad (9.32)$$

енергію $\varepsilon_i^{(1)}$ і одночастинкові хвильові функції електрона $\varphi_i^{(1)}(\vec{r}_i)$ в першому наближенні. Знаючи функції $\varphi_i^{(1)}(\vec{r}_i)$, можна обчислити самоузгоджений потенціал в другому наближенні. Він, в свою чергу, визначає енергію і хвильову функцію в другому наближенні.

Після того, як знайдені одночасткові енергії ε_i , можна розрахувати і повну енергію атома E . Остання визначається як середнє по хвильовій функції (9.24) від повного гамільтоніана:

$$\begin{aligned} E &= \int \prod_{i=1}^Z d^3 r_i \varphi_i^*(\vec{r}_i) \hat{H} \varphi_i(\vec{r}_i) = \sum_{i=1}^Z \int d^3 r_i \varphi_i^*(\vec{r}_i) \hat{H}_i \varphi_i(\vec{r}_i) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^Z \sum_{j \neq i} \int d^3 r_i d^3 r_j \varphi_i^*(\vec{r}_i) \varphi_j^*(\vec{r}_j) V_{ij}(r_{ij}) \varphi_i(\vec{r}_i) \varphi_j(\vec{r}_j) = \quad (9.33) \\ &= \sum_{i=1}^Z \varepsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^Z \sum_{j \neq i} \int d^3 r_i d^3 r_j \varphi_i^*(\vec{r}_i) \varphi_j^*(\vec{r}_j) V_{ij}(r_{ij}) \varphi_i(\vec{r}_i) \varphi_j(\vec{r}_j). \end{aligned}$$

Таким чином, сумарна енергія окремих електронів відрізняється від повної енергії атома. Їх різниця представляє собою електростатичну енергію взаємодії електронів. Дійсно, енергія одного електрона ε_i визначена так, що вона включає електростатичну енергію відштовхування з усіма іншими електронами і тому в перший член в третій стрічці (9.33) вона входить двічі. В результаті виникає другий член, який усуває подвійний підрахунок електростатичної енергії.

9.3.2. Врахування принципу Паулі

Отриманий самоузгоджений потенціал не враховує принцип Паулі для електронів. Самоузгоджене поле з врахуванням принципу Паулі отримав Фок. З цією метою він виходив з пробної функції, яка залежить як від просторових, так і від спінових змінних

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_Z) = \sqrt{\frac{1}{Z!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\xi_1) & \varphi_1(\xi_2) & \dots & \varphi_1(\xi_Z) \\ \varphi_2(\xi_1) & \varphi_2(\xi_2) & \dots & \varphi_2(\xi_Z) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_Z(\xi_1) & \varphi_Z(\xi_2) & \dots & \varphi_Z(\xi_Z) \end{vmatrix}, \quad (9.34)$$

де ξ_i - сукупність координати і спінової змінної i -ї частинки. При цьому вважається, що одноелектронні функції є розв'язками рівняння Шрьодінгера з самоузгодженим центрально-симетричним потенціалом. В цьому випадку електрони можна характеризувати набором квантових чисел l, m, s .



Рис. 16. Володимир Олександрович Фок. Незалежно від Клейна та Гордона запропонував релятивістське рівняння для скалярної частинки (рівняння Клейна-Гордона-Фока), розвинув важливий метод розрахунку багаточастинкових систем (метод Хартрі-Фока), зробив інші значні внески у атомну фізику, квантову теорію та теорію гравітації.

Для атомів з замкненою електронною оболонкою можна побудувати тільки одну хвильову функцію (9.34). Для атомів з незамкненою оболонкою існує декілька хвильових функцій типу (9.34). Прикладом може служити $1s2s$ конфігурація гелію. В останньому випадку координатні частини хвильових функцій будуть відрізнятися типом перестановочної симетрії. В свою чергу, для кожної перестановочної симетрії буде свій самоузгоджений

потенціал. Так, для атома парагелію хвильові функції визначаються з системи інтегро-диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} (\hat{H}_0 + U_{22} - \varepsilon_1)\varphi_1 + U_{21}\varphi_2 = 0, \\ (\hat{H}_0 + U_{11} - \varepsilon_2)\varphi_2 + U_{12}\varphi_1 = 0, \end{cases}$$

де

$$U_{11}(\vec{r}_1) = \int d^3r_2 \varphi_1^*(\vec{r}_2) V_{12}(r_{12}) \varphi_1(\vec{r}_2),$$

$$U_{21}(\vec{r}_1) = \int d^3r_2 \varphi_2^*(\vec{r}_2) V_{12}(r_{12}) \varphi_1(\vec{r}_2)$$

і аналогічно для U_{22} і U_{12} .

Відповідно для ортогелію отримаємо

$$\begin{cases} (\hat{H}_0 + U_{22} - \varepsilon_1)\varphi_1 - U_{21}\varphi_2 = 0, \\ (\hat{H}_0 + U_{11} - \varepsilon_2)\varphi_2 - U_{12}\varphi_1 = 0. \end{cases}$$

В рамках підходу Хартрі пара- і орто-рівні співпадають тому що в цьому випадку обмінний потенціал U_{12} відсутній.

Задачі

9.1. Для системи двох частинок із спіном s побудувати симетричні та антисиметричні спінові функції. Знайти скільки існує симетричних та антисиметричних хвильових функцій. Зокрема розглянути випадки частинок із спіном $s = 1/2$, виписати явно відповідні хвильові функції, визначити чому дорівнює повний спін S для кожної з них.

9.2. В ядерній фізиці часто розглядають протон та нейтрон, як два зарядових стани однієї частинки, яку називають нуклон. При цьому діє *узагальнений принцип Паулі*, який вимагає антисиметрії хвильової функції відносно перестановки будь-яких двох нуклонів. Виходячи з узагальненого принципу Паулі встановити яке значення повного моменту кількості руху I має двонуклонна система, яка знаходиться у стані з відносним орбітальним моментом $L = 0$ (S - стан), в залежності від нуклонного складу системи.

9.3. Пояснити з точки зору симетрії хвильової функції продуктів розпаду чому ρ^0 -мезон не розпадається по каналу $\rho^0 \rightarrow \pi^0 + \pi^0$, але розпадається по каналу $\rho^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$. Спін π -мезонів дорівнює 0, а спін ρ^0 - мезону дорівнює 1. Скрізь верхній індекс означає електричний заряд частинки.

РОЗДІЛ 10. МЕТОД ВТОРИННОГО КВАНТУВАННЯ

10.1. Метод вторинного квантування системи тотожних бозонів

Для опису системи тотожних частинок зручно перейти до особливого представлення, яке називається *представленням чисел заповнення* або *представленням вторинного квантування*. Як говорилося вище, для системи тотожних частинок важливу роль грають симетрії відносно перестановок частинок. Причому хвильова функція системи тотожних бозонів має бути симетричною, а системи ферміонів – антисиметричною відносно їх перестановки. У зв'язку з цим опис систем бозонів і ферміонів в представленні вторинного квантування різний. Розглянемо спочатку, як це робиться для бозонів.

10.1.1. Оператори народження, знищення і числа частинок

На перших порах будемо вважати, що взаємодія між частинками відсутня. В рамках координатного представлення така система описується симетризованою хвильовою функцією:

$$\Psi_{n_1 n_2 \dots n_r \dots} = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_r! \dots}{N!}} \sum_{\alpha} P_{\alpha} \varphi_{k_1}(\xi_1) \varphi_{k_2}(\xi_2) \dots \varphi_{k_N}(\xi_N), \quad (10.1)$$

де $n_1, n_2, \dots, n_r, \dots$ - число частинок, що знаходяться в квантових станах $1, 2, \dots, r, \dots$, а $\varphi_{k_i}(\xi_i)$ - хвильова функція окремої частинки в квантовому стані k_i ($k_i = 1, 2, \dots, r, \dots$); P_{α} означає оператор перестановки частинок; в загальному випадку ξ_i представляють сукупність спінових і координатних змінних.

В представленні чисел заповнення в якості незалежних змінних розглядаються не координати ξ_i , а числа $n_1, n_2, \dots, n_r, \dots$, які називають *числами заповнення*. Очевидно, що задавши число частинок в кожному з квантових станів тим самим задається і повна хвильова функція (10.1). Тому замість (10.1) будемо використовувати бра-вектор

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_r, \dots\rangle. \quad (10.2)$$

З огляду на те, що тепер незалежними змінними є числа заповнення, всі фізичні оператори будуть діяти не на координати ξ_i , а на дискретні змінні $n_1, n_2, \dots, n_r, \dots$ і подальшою метою є побудова таких операторів. Для цього вводиться спеціальний оператор \hat{a}_r , який діє на хвильову функцію (10.2) згідно

$$\hat{a}_r |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = \sqrt{n_r} |n_1, n_2, \dots, n_r - 1, \dots\rangle. \quad (10.3)$$

Іншими словами, цей оператор зменшує число частинок, що знаходяться в квантовому стані r на одиницю, а також змінює нормування хвильової функції. Його називають *оператором знищення* частинок в квантовому стані r .

Обчислимо матричний елемент від оператора \hat{a}_r по двох довільних квантових станах, що задаються числами заповнення $n_1, n_2, \dots, n_r, \dots$ і $n'_1, n'_2, \dots, n'_r, \dots$. На основі (10.3) легко знаходимо:

$$\begin{aligned} \langle n'_1, n'_2, \dots, n'_r, \dots | \hat{a}_r | n_1, n_2, \dots, n_r, \dots \rangle = \\ = \sqrt{n_r} \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_{r-1} n'_{r-1}} \delta_{(n_r-1) n'_r} \delta_{n_{r+1} n'_{r+1}} \dots \end{aligned} \quad (10.4)$$

Звичайно, співвідношення (10.4) можна також розглядати як визначення оператора \hat{a}_i в матричному записі.

Згідно означення, ермітово спряжена матриця до (10.4) відповідає матричним елементам оператора \hat{a}_r^+ :

$$\begin{aligned} \langle n'_1, n'_2, \dots, n'_r, \dots | \hat{a}_r^+ | n_1, n_2, \dots, n_r, \dots \rangle = \\ = \sqrt{n_r + 1} \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_{r-1} n'_{r-1}} \delta_{(n_r+1) n'_r} \delta_{n_{r+1} n'_{r+1}} \dots \end{aligned} \quad (10.5)$$

Звідси отримуємо закон дії оператора \hat{a}_r^+ на вектор стану:

$$\hat{a}_r^+ |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = \sqrt{n_r + 1} |n_1, n_2, \dots, n_r + 1, \dots\rangle. \quad (10.6)$$

Цей оператор збільшує число частинок в квантовому стані r на одиницю і називається *оператором народження*.

На основі (10.3) і (10.6) можна знайти дію оператора $\hat{a}_r^+ \hat{a}_r$ на вектор стану:

$$\begin{aligned} \hat{a}_r^+ \hat{a}_r |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = \sqrt{n_r} \hat{a}_r^+ |n_1, n_2, \dots, n_r - 1, \dots\rangle = \\ = n_r |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (10.7)$$

Звідси випливає, що вектор стану $|n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle$ є власною функцією оператора $\hat{a}_r^+ \hat{a}_r$ з власним значенням n_r . Тому доречно назвати цей оператор *оператором числа частинок* в квантовому стані r .

Знайдемо комутаційні співвідношення між операторами народження та знищення. Виходячи з їх означення (10.3) та (10.6) очевидно, що:

$$[\hat{a}_r, \hat{a}_l^+] = 0, \quad \text{якщо } r \neq l. \quad (10.8)$$

З іншої сторони, легко показати, що хвильова функція (10.2) є власною функцією оператора $\hat{a}_r \hat{a}_r^+$ з власним значенням $n_r + 1$

$$\begin{aligned} \hat{a}_r \hat{a}_r^+ |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle &= \sqrt{n_r + 1} \hat{a}_r |n_1, n_2, \dots, n_r + 1, \dots\rangle = \\ &= (n_r + 1) |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (10.9)$$

Тоді на основі (10.7) і (10.9) можна зробити висновок, що для будь-якого вектора стану

$$[\hat{a}_r, \hat{a}_r^+] |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle. \quad (10.10)$$

Співвідношення (10.8) і (10.9) можна об'єднати в комутаційне співвідношення

$$[\hat{a}_r, \hat{a}_r^+] = \delta_{rl}. \quad (10.11)$$

Аналогічно доводиться, що

$$[\hat{a}_r, \hat{a}_l] = [\hat{a}_r^+, \hat{a}_l^+] = 0. \quad (10.12)$$

10.1.2. Стан багатьох частинок

Введемо вакуумний стан $|0\rangle$, тобто такий стан, який будь-яким оператором знищення \hat{a}_i переводиться в нуль:

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0 |0\rangle = 0. \quad (10.13)$$

Вважаємо при цьому, що вакуумний стан нормовано

$$\langle 0 | 0 \rangle = 1. \quad (10.14)$$

Діючи n раз на вакуумний стан оператором народження \hat{a}_i , отримаємо стан, в якому n частинок знаходяться в i -му квантовому стані

$$\left(\hat{a}_i^+\right)^n |0\rangle = N |0, 0, \dots, 0, n, 0, \dots, 0\rangle, \quad (10.15)$$

де N – невідомий докищо коефіцієнт. Дійсно, на основі комутаційних співвідношень (10.11), (10.12) легко побачити, що вектор (10.15) являється власним вектором оператора числа частинок з власним значенням n

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i |0, 0, \dots, 0, n, 0, \dots, 0\rangle &= N \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \left(\hat{a}_i^+\right)^n |0\rangle = \\ &= N \left[\hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \left(\hat{a}_i^+\right)^{n-1} + \left(\hat{a}_i^+\right)^n \right] |0\rangle = \\ &= N \left[\left(\hat{a}_i^+\right)^3 \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \left(\hat{a}_i^+\right)^{n-2} + 2 \left(\hat{a}_i^+\right)^n \right] |0\rangle = \dots = \\ &= N n \left(\hat{a}_i^+\right)^n |0\rangle = n |0, 0, \dots, 0, n, 0, \dots, 0\rangle. \end{aligned} \quad (10.16)$$

Користуючись комутаційними співвідношеннями і визначенням вакуумного стану (10.13) знайдемо константу нормування N . Для цього запишемо умову нормування вектора стану (10.15)

$$\begin{aligned} \langle 0, 0, \dots, 0, n, 0, \dots, 0 | 0, 0, \dots, 0, n, 0, \dots, 0 \rangle &= \\ &= \frac{1}{N^2} \langle 0 | \left(\hat{a}_i\right)^n \left(\hat{a}_i^+\right)^n |0\rangle = 1 \end{aligned} \quad (10.17)$$

і будемо “пересовувати” в його лівій частині оператори знищення вправо через оператори народження, доки оператор знищення не подіє на вакуум. Потім скористаємося визначенням вакууму (10.13). В результаті отримаємо

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N^2} \langle 0 | (\hat{a}_i)^n (\hat{a}_i^+)^n | 0 \rangle = \\
& = \frac{1}{N^2} \langle 0 | \left[(\hat{a}_i)^{n-1} \hat{a}_i \hat{a}_i^+ (\hat{a}_i^+)^{n-1} + (\hat{a}_i)^{n-1} (\hat{a}_i^+)^{n-1} \right] | 0 \rangle = \dots = \\
& = \frac{1}{N^2} \langle 0 | \left[(\hat{a}_i)^{n-1} \hat{a}_i^+ (\hat{a}_i^+)^{n-1} + n (\hat{a}_i)^{n-1} (\hat{a}_i^+)^{n-1} \right] | 0 \rangle = \\
& = \frac{n}{N^2} \langle 0 | (\hat{a}_i)^{n-1} (\hat{a}_i^+)^{n-1} | 0 \rangle.
\end{aligned} \tag{10.18}$$

Повторюючи цю процедуру ще $n-1$ раз, знайдемо, що

$$\frac{1}{N^2} \langle 0 | (\hat{a}_i)^n (\hat{a}_i^+)^n | 0 \rangle = \frac{n!}{N^2} \langle 0 | 0 \rangle = \frac{n!}{N^2} = 1. \tag{10.19}$$

Звідси випливає, що нормований вектор n тотожних бозонів в стані k_i стані є

$$|0, 0, \dots, 0, n, 0, \dots, 0\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}} (\hat{a}_i^+)^n |0\rangle. \tag{10.20}$$

Діючи на вакуум певним числом операторів народження по кожному квантовому станіві, отримаємо вектор стану $|n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle$

$$\begin{aligned}
& |n_1, n_2, \dots, n_r, \dots\rangle = \\
& = \sqrt{\frac{1}{n_1! n_2! \dots n_r! \dots}} (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \dots (\hat{a}_r^+)^{n_r} \dots |0\rangle.
\end{aligned} \tag{10.21}$$

10.1.3. Оператори фізичних величин

Тепер знайдемо вираз для операторів фізичних величин через оператори народження і знищення. Для початку розглянемо випадок, коли фізична величина може бути представлена як сума відповідних величин для окремих частинок

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}^{(i)}. \tag{10.22}$$

Тепер знайдемо матричний елемент оператора $\hat{f}^{(i)}$

$$\begin{aligned}
& \left\langle n'_1, \dots, n'_i, \dots, n'_r \left| \hat{f}^{(i)} \right| n_1, \dots, n_i, \dots, n_r \right\rangle = \\
& = \frac{\sqrt{n'_1! \dots n'_i! \dots n'_r! n_1! \dots n_i! \dots n_r!}}{N!} \times \\
& \times \sum_{\alpha, \beta} \int d^3 r_1 \dots d^3 r_N P_\alpha \left[\psi_{k'_1}^* (\vec{r}_1) \dots \psi_{k'_i}^* (\vec{r}_i) \dots \psi_{k'_N}^* (\vec{r}_N) \right] \hat{f}^{(i)} \times \\
& \times P_\beta \left[\psi_{k_1} (\vec{r}_1) \dots \psi_{k_i} (\vec{r}_i) \dots \psi_{k_N} (\vec{r}_N) \right],
\end{aligned} \tag{10.23}$$

де сума береться по всіх перестановках тотожних бозонів в початковому і кінцевому станах, а N – число частинок. Нагадаємо, що індекс k_i позначає квантові числа i -ї частинки. В результаті дії оператора перестановки будуть переставлятися координати відповідних частинок при фіксованих індексах k_i .

Розглянемо матричний елемент

$$\left(\hat{f}^{(i)} \right)_{jl} \equiv \int d^3 r_i \psi_{k'_j}^* (\vec{r}_i) \hat{f}^{(i)} \psi_{k_l} (\vec{r}_i). \tag{10.24}$$

Його можна розглядати як квантовий перехід із знищенням однієї частинки в квантовому стані k_l і народження частинки в стані k'_j .

Тоді матричний елемент (10.23) запишеться через (10.24)

$$\begin{aligned}
& \left\langle n'_1, \dots, n'_i, \dots, n'_r \left| \hat{f}^{(i)} \right| n_1, \dots, n_i, \dots, n_r \right\rangle = \\
& = \sum_{l,j} \prod_{p \neq l, q \neq j} \frac{\sqrt{n'_1! \dots n'_i! \dots n'_r! n_1! \dots n_i! \dots n_r!}}{N!} \delta_{n n_j} \dots \frac{(N-1)!}{n_1! \dots (n_j-1)! \dots (n_j-1)!} \times \\
& \times \left(\hat{f}^{(i)} \right)_{jl} \delta_{(n_j-1) n'_j} \delta_{n_j (n'_j+1)} = \\
& = \frac{1}{N} \sum_{jl} \prod_{p \neq l, q \neq j} \delta_{n_p n'_q} \dots \sqrt{n_j n_l} \left(\hat{f}^{(i)} \right)_{jl} \delta_{(n_j-1) n'_j} \delta_{n_j (n'_j+1)}.
\end{aligned} \tag{10.25}$$

Матричний елемент (10.24) однаковий для всіх i , тому індекс i може бути опущений $f_{jl} = \left(\hat{F}^{(i)} \right)_{jl}$, а матричний елемент оператора (10.22) буде в N раз більший, ніж (10.25)

$$\begin{aligned} & \langle n'_1, \dots, n'_l, \dots, n'_r | \hat{F} | n_1, \dots, n_l, \dots, n_r \rangle = \\ & = \sum_{jl} \prod_{p \neq l, q \neq j} \delta_{n_p n'_q} \dots \sqrt{n_j n_l} (\hat{f})_{jl} \delta_{(n_j-1)n'_j} \delta_{n_j(n'_j+1)}. \end{aligned} \quad (10.26)$$

В тому випадку, коли $l = j$, $n'_l = n_l$ матричний елемент буде діагональним

$$\begin{aligned} & \langle n'_1, \dots, n'_l, \dots, n'_r | \hat{F} | n_1, \dots, n_l, \dots, n_r \rangle = \\ & = \sum_{jl} \prod_{p \neq l, q \neq j} \delta_{n_p n'_q} \dots (\hat{f})_{jj} \delta_{(n_j-1)n'_j} \delta_{n_j(n'_j+1)} \dots \end{aligned} \quad (10.27)$$

Результати (10.26) і (10.27) легко записати в операторному виді, якщо

$$\hat{F} = \sum_{jl} f_{jl} \hat{a}_j^+ \hat{a}_l = \sum_{jl} \langle j | f | l \rangle \hat{a}_j^+ \hat{a}_l. \quad (10.28)$$

Для прикладу розглянемо гамільтоніан системи неваємодіючих друг з другом тотожних бозонів

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i, \quad \text{де} \quad \hat{H}_i = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}_i). \quad (10.29)$$

Якщо хвильові функції $\psi_{k_i}(\vec{r}_i)$ є власними функціями гамільтоніану \hat{H}_i , то на основі (10.28) маємо для повного гамільтоніана наступний вираз в представленні чисел заповнення

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \varepsilon_j \hat{a}_j^+ \hat{a}_j, \quad (10.30)$$

де ε_j - власне значення гамільтоніана однієї частинки H_i . Власними функціями гамільтоніана будуть (10.20), яким відповідають власні значення

$$E_{n_1, \dots, n_r, \dots} = \sum_j n_j \varepsilon_j. \quad (10.31)$$

Тепер розглянемо оператори, що діють на координати двох частинок. Прикладом такого оператора може бути енергія взаємного відштовхування двох зарядів. Нехай

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^N \hat{A}^{ij} . \quad (10.32)$$

В представленні вторинного квантування його можна записати

$$\hat{A} = \sum_{n,m,k,l} \langle nm | \hat{A}^{ij} | kl \rangle \hat{a}_n^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_k \hat{a}_l , \quad (10.33)$$

$$\langle nm | \hat{A}^{ij} | kl \rangle = \int d^3 r d^3 r' \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m^*(\vec{r}') \hat{A}^{ij}(\vec{r}, \vec{r}') \psi_l(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}') . \quad (10.34)$$

Отже, гамільтоніан атома тепер можна записати

$$\hat{H} = \sum_{l,k} \hat{H}_{lk}^{(i)} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{n,m,k,l} \langle nm | V^{ij} | lk \rangle \hat{a}_n^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_l \hat{a}_k , \quad (10.35)$$

де V_{ij} – взаємодія між i -им і j -им електронами. Останній член в (10.35) має просту фізичну інтерпретацію: два електрона, які знаходяться в квантових станах k і l , розсіюються і переходять в квантові стани n і m .

Ці формули можна формально отримати, якщо замінити хвильову функцію $\psi(\vec{r})$ на наступний вектор

$$\psi(\vec{r}) \rightarrow \hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_k \hat{a}_k \psi_k(\vec{r}) \quad (10.36)$$

і розглянути “середнє” від оператора. З цим прийомом і пов’язана назва метода вторинного квантування, формально як оператори розглядаються не тільки фізичні величини, але й самі хвильові функції.

10.2. Вторинне квантування для ферміонів

Всі формули для операторів, як і формула (10.21) для хвильової функції, залишаються справедливими і для випадку ферміонів. Однак при цьому змінюються властивості операторів народження і знищення.

Дійсно, в одному квантовому стані може знаходитися не більше одного ферміона. Тому власними значеннями оператора числа частинок можуть бути тільки 0 чи 1. Цю умову можна задовольнити, якщо вимагати, щоб між операторами народження і знищення виконувалися співвідношення (10.11) і (10.12) з заміною комутаторів на антикомутатори, тобто

$$\{\hat{a}_r, \hat{a}_l^+\} = \delta_{rl}, \quad (10.37)$$

$$\{\hat{a}_r, \hat{a}_l\} = \{\hat{a}_r^+, \hat{a}_l^+\} = 0, \quad (10.38)$$

де фігурні дужки означають *антикомутатор*

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (10.39)$$

Відмітимо, що з (10.38) випливає, що

$$\hat{a}_k^2 = \hat{a}_k^{+2} = 0. \quad (10.40)$$

Тепер покажемо, що ці антикомутаційні співвідношення приводять до того, що власні значення оператора числа частинок приймають тільки значення 1 і 0. Для цього розглянемо квадрат оператора числа частинок

$$\begin{aligned} (\hat{a}_k^+ \hat{a}_k)^2 &= \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k = \hat{a}_k^+ (1 - \hat{a}_k^+ \hat{a}_k) \hat{a}_k = \\ &= \hat{a}_k^+ \hat{a}_k - (\hat{a}_k^+)^2 (\hat{a}_k)^2 = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k. \end{aligned} \quad (10.41)$$

Діагональний матричний елемент від правої і лівої частини цієї рівності дає

$$n_k^2 = n_k, \quad (10.42)$$

що справедливо, якщо тільки $n_k = 0$ чи 1.

10.3. Гармонічний осцилятор

Покажемо як може бути застосований метод вторинного квантування на прикладі квантового гармонічного осцилятора.

При невеликих відхиленнях x від положення рівноваги потенційна енергія дорівнює $\frac{1}{2} \kappa x^2$, де κ - коефіцієнт пружності.

В класичному випадку частинка, яка знаходиться у такому потенціалі, виконує гармонічні коливання з частотою $\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}$, де

m - маса частинки. У квантовому випадку частинка описується наступним стаціонарним рівнянням Шрьодінгера

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} \kappa x^2 \right) \psi(x) = E \psi(x). \quad (10.43)$$

Введемо оператор

$$\hat{a} = i \sqrt{\frac{1}{2\hbar\omega m}} \hat{p} + \sqrt{\frac{\omega m}{2\hbar}} x. \quad (10.44)$$

Оператор, ермітово спряжений до нього, є

$$\hat{a}^\dagger = -i \sqrt{\frac{1}{2\hbar\omega m}} \hat{p} + \sqrt{\frac{\omega m}{2\hbar}} x. \quad (10.45)$$

Виходячи з комутаційних співвідношень між операторами координати та імпульсу (1.34) легко знайти комутатор між операторами (10.44) та (10.45)

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, x] = 1, \quad (10.46)$$

який співпадає з (10.11). Таким чином, оператори \hat{a}^\dagger та \hat{a} можна розглядати як оператори народження та знищення. Виражаючи оператори імпульсу та координати через оператори народження та знищення

$$\hat{p} = i \sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}), \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (10.47)$$

запишемо гамільтоніан у вигляді

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right).$$

Тоді рівняння Шрьодінгера прийме вигляд

$$\hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = E |n\rangle,$$

де $|n\rangle$ - хвильова функція у представленні чисел заповнення. При цьому число “частинок” n визначається як власне значення оператора числа частинок $\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$, а хвильова функція, згідно (10.20), є

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle. \quad (10.48)$$

Таким чином одержуємо, що енергетичний спектр гармонічного осцилятора є

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (10.49)$$

де $n = 0, 1, 2, \dots$. Найнижчому рівню відповідає енергія $\frac{1}{2} \hbar\omega$.

Натомість для класичного осцилятора найнижча енергія дорівнює нулеві, що відповідає частинці, яка знаходиться у положенні рівноваги.

Розрахуємо матричні елементи операторів координати та імпульсу в представленні чисел заповнення.

Використовуючи (10.47) та (10.48) для матричного елемента координати пишемо

$$\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\frac{1}{n'!n!}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}} \left(\langle 0 | \hat{a}^{n'} \hat{a}^{\dagger n+1} | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{a}^{n'+1} \hat{a}^{\dagger n} | 0 \rangle \right).$$

Обчислимо середнє по вакуумному стану від добутку $\hat{a}^{\dagger n_1} \hat{a}^{n_2}$. Окремо розглянемо два випадки, коли $n_1 > n_2$ та $n_1 < n_2$. В першому випадку будемо з допомогою комутаційного співвідношення (10.46) просувати оператори \hat{a}^\dagger направо, а в другому – наліво. Таким чином одержимо

$$\langle 0 | \hat{a}^{\dagger n_1} \hat{a}^{n_2} | 0 \rangle = \begin{cases} \langle 0 | \hat{a}^{\dagger(n_1-n_2)} | 0 \rangle = 0 & \text{при } n_2 > n_1, \\ \langle 0 | \hat{a}^{(n_2-n_1)} | 0 \rangle = 0 & \text{при } n_1 > n_2. \end{cases} \quad (10.50)$$

При одержанні цієї формули було використано визначення вакуумного стану (10.13) $\hat{a}|0\rangle = 0$ та $\langle 0|\hat{a}^\dagger = 0$. Внаслідок цього отримуємо, що цей матричний елемент дорівнює нулеві, якщо $n_1 \neq n_2$. Випадок, коли $n_1 = n_2$, вже був розглянутий при виводі формули (10.18). Таким чином одержуємо

$$\langle 0 | \hat{a}^{\dagger n_1} \hat{a}^{n_2} | 0 \rangle = \delta_{n_1 n_2} n_1!.$$

Звідси зразу випливає

$$\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}} \left(\sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} + \sqrt{n} \delta_{n', n-1} \right).$$

Відповідно матричний елемент оператора імпульсу дорівнює

$$\langle n' | \hat{p} | n \rangle = i\sqrt{\hbar \omega m} \left(\sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} - \sqrt{n} \delta_{n', n-1} \right).$$

З (10.49) та результату Задачі 10.1 маємо $E_n = m\omega^2 \langle x^2 \rangle$, що співпадає з класичним співвідношенням між відповідними величинами у класичній механіці.

Підкреслимо, що ці результати одержано базуючись лише на комутаційному співвідношенні між операторами імпульсу та координати. Явний вигляд цих операторів ніде не було використано.

Підставляючи у вираз для оператора знищення \hat{a} оператор імпульсу одержимо

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}} \frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\frac{\omega m}{2\hbar}} x.$$

Відповідно до (10.13) та (10.14) вакуумний стан (хвильова функція основного стану) є

$$|0\rangle = \psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{\omega m}{\hbar \pi}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2},$$

де $\xi = \sqrt{\omega m / \hbar} x$. Тоді на основі (10.48) можна показати, що для довільного стану хвильова функція буде

$$|n\rangle = \psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{\omega m}{\hbar \pi}} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2},$$

де $H_n(\xi)$ - поліном Ерміта n -го ступеня.

Задачі

10.1. Використовуючи формалізм чисел заповнення розрахувати середні значення x^2 та x^4 для гармонічного осцилятора.

10.2. При яких значеннях коефіцієнтів A та B перехід від операторів народження та знищення \hat{a}^\dagger та \hat{a} до нових операторів

$\hat{a}^\dagger = A\hat{a}^\dagger + B\hat{a}$ та $\hat{\tilde{a}} = A\hat{a} + B\hat{a}^\dagger$ буде канонічним, тобто збережуться комутаційні співвідношення? Розглянути обидва випадки, бозе та фермі операторів.

10.3. Для бозе операторів народження та знищення \hat{a}^\dagger та \hat{a} (див. результати попередньої задачі) побудувати вакуумний стан $|\tilde{0}\rangle$. Знайти розподіл бозонів у новому вакуумному стані.

РОЗДІЛ 11. КВАНТОВА ТЕОРІЯ РОЗСІЯННЯ

11.1. Пружне розсіяння частинок без спини

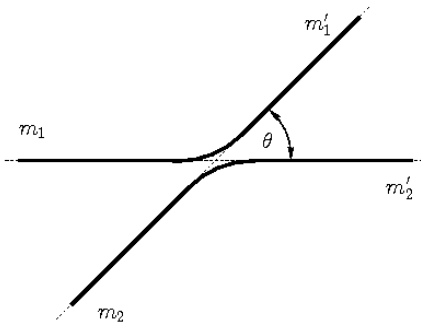


Рис. 17. Розсіяння двох частинок з масами m_1 і m_2 .

При пружному зіткненні частинок внутрішній стан частинок не змінюється. Як приклад на Рис. 17 зображено класичний рух двох частинок з масами m_1 і m_2 в системі їх центра мас. В процесі розсіяння змінюються напрямки їх руху і, відповідно, імпульсів, а енергія і абсолютне

значення імпульсу в системі центра мас не змінюються.

Будемо вважати, що розсіяння частинок виникає внаслідок взаємодії $V(\vec{r})$, $\vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. Відомо, що в класичній механіці така задача зводиться до задачі про рух однієї частинки з приведеною

масою $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ у зовнішньому потенціалі $V(\vec{r})$. Подібна

ситуація має місце і в квантовому випадку, опис процесу розсіяння можна замінити на стаціонарну задачу, при якій потік частинок з масою μ , що рухається із нескінченності, розсіюється внаслідок взаємодії з потенціалом $V(\vec{r})$. Хвильова функція, яка описує такий потік, визначається зі стаціонарного рівняння Шрьодінгера

$$(\Delta + k^2) \psi(\vec{r}) = \frac{2\mu V(\vec{r})}{\hbar^2} \psi(\vec{r}). \quad (11.1)$$

Вважається, що область взаємодії між частинками обмежена:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} V_0(\vec{r}) \neq 0, & \text{якщо } r \leq d, \\ 0, & \text{якщо } r > d. \end{cases} \quad (11.2)$$

Тоді, при $r > d$ рух частинок вільний, і хвильова функція в початковому стані визначається рівнянням Шрьодінгера (11.1) без правої частини. Звідси випливає, що початкова хвильова функція відносного руху частинок є

$$\psi_{\text{поч.}}(\vec{r}) \equiv \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = N \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (11.3)$$

де \vec{k} - хвильовий вектор, причому $E = \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2\mu}$. Іншими словами,

на нескінченності частинки рухаються вільно, їх енергія позитивна і не квантована.

Зручно використовувати таке нормування хвильової функції, при якій щільність потоку частинок в початковому стані $\vec{j}_{\text{поч.}}$ чисельно дорівнювала швидкості частинок:

$$\vec{j}_{\text{поч.}} = \frac{\hbar}{2i\mu} (\psi_{\text{поч.}}^* \nabla \psi_{\text{поч.}} - \psi_{\text{поч.}} \nabla \psi_{\text{поч.}}^*) = \frac{\hbar \vec{k}}{\mu}. \quad (11.4)$$

Звідси в (11.3) отримуємо константу нормування $N = 1$.

Задача полягає у відшуванні такого розв'язку рівняння Шрьодінгера (11.1), який би описував суперпозицію падаючої плоскої хвилі і розсіяної хвилі, яка йде від області дії сил. Будемо це робити за допомогою функції Гріна $G(\vec{r}, \vec{r}')$, яка за визначенням є розв'язком наступного диференціального рівняння

$$(\Delta + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (11.5)$$

де вважається, що оператор Лапласа діє на змінну \vec{r} . Тоді загальний розв'язок рівняння

$$(\Delta + k^2) \Phi(\vec{r}) = A(\vec{r}) \quad (11.6)$$

має вигляд

$$\Phi(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) + \int G(\vec{r}, \vec{r}') A(\vec{r}') d^3 r', \quad (11.7)$$

де $\phi(\vec{r})$ - розв'язок рівняння (11.6) без правої частини, $(\Delta + k^2)\phi(\vec{r}) = 0$. Дійсно, діючи на (11.7) оператором $\Delta + k^2$ отримаємо

$$(\Delta + k^2) \Phi(\vec{r}) = (\Delta + k^2)\phi(\vec{r}) + \int (\Delta + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') A(\vec{r}') d^3 r' = \quad (11.8)$$

$$= \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') A(\vec{r}') d^3 r' = A(\vec{r}).$$

Таким чином задача зводиться до знаходження з рівняння (11.5) функції Гріна.

11.2. Функція Гріна для вільної частинки

Формально рівняння (11.5) можна переписати як

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = (\Delta + k^2)^{-1} \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (11.9)$$

Тут обернений оператор $(\Delta + k^2)^{-1}$ слід розглядати як ряд

$$(\Delta + k^2)^{-1} = \frac{1}{k^2} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{\Delta}{k^2} \right)^n \right]. \quad (11.10)$$

Підставляючи в якості δ -функції її інтегральне представлення, отримаємо для функції Гріна

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}') &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int d^3 q (\Delta + k^2)^{-1} \exp[i(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{q}] = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int d^3 q \frac{1}{k^2} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{\Delta}{k^2} \right)^n \right] \exp[i(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{q}] = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int d^3 q \frac{1}{k^2} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{iq}{k} \right)^{2n} \right] \exp[i(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{q}] = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int d^3 q \frac{\exp[i(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{q}]}{k^2 - q^2}. \end{aligned} \quad (11.11)$$

Виконуючи інтегрування по кутовим змінним в останньому виразі, зведемо його до одномірного інтегралу

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}') &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int_0^{\infty} dq q^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{\exp(i \cos \theta |\vec{r} - \vec{r}'| q)}{k^2 - q^2} = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{i|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_0^{\infty} dq q \frac{\exp(i|\vec{r} - \vec{r}'| q) - \exp(-i|\vec{r} - \vec{r}'| q)}{k^2 - q^2} = \end{aligned} \quad (11.12)$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \frac{1}{i|\vec{r}-\vec{r}'|} \int_{-\infty}^{\infty} dq q \frac{\exp(i|\vec{r}-\vec{r}'|q)}{k^2 - q^2}.$$

Останній інтеграл невизначений, доки не будуть задані правила обходу полюсів в точках $q = \pm k$. Для цього зручно використовувати формальний прийом додавання нескінченно малої уявної добавки до хвильового числа

$$k \rightarrow k \pm i\varepsilon, \text{ де } \varepsilon > 0, \quad (11.13)$$

зі спрямуванням ε до нуля в кінцевому результаті. У випадку позитивної добавки полюси в підінтегральній функції виразу (11.12) змістяться, як це показано в лівій частині Рис. 18. Далі можна замкнути контур інтегрування зверху і використати формулу Коші

$$G_+(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \exp(ik|\vec{r}-\vec{r}'|). \quad (11.14)$$

Отриманий вираз відповідає хвилі, що розходиться.

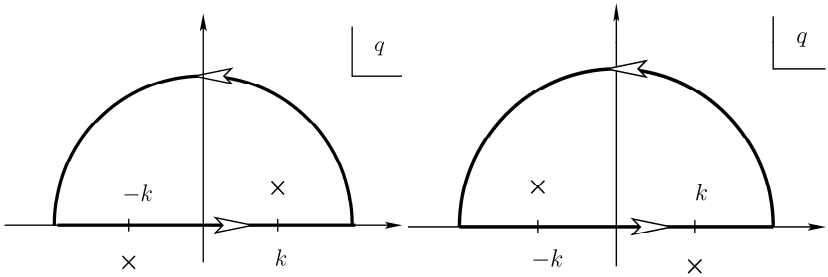


Рис. 18. Контур інтегрування для функцій Гріна, які відповідають хвилі, що розходиться, G_+ (ліворуч), і хвилі, що сходиться, G_- (праворуч). Хрестиками позначені полюси підінтегральної функції.

В випадку від'ємної добавки розміщення полюсів показано в правій частині Рис. 18 і функція Гріна зводиться до виразу:

$$G_-(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \exp(-ik|\vec{r}-\vec{r}'|), \quad (11.15)$$

що відповідає хвилі, яка сходиться.

11.3. Амплітуда розсіяння і диференціальний переріз пружного розсіяння

За допомогою загальної формули (11.7) хвильова функція, яка є розв'язком рівняння (11.1) і являє собою суму падаючої хвилі і хвилі, що розходитьсся від області дії сил, може бути записана через функцію Гріна $G_+(\vec{r}, \vec{r}')$:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3r' G_+(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') = \\ &= \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}'). \end{aligned} \quad (11.16)$$

(11.16) представляє собою ніщо інше, як інтегральне рівняння на функцію $\psi(\vec{r})$.

Подивимось, до чого зведеться (11.16) при $r \rightarrow \infty$. З цією метою розкладемо фазу експоненти за малим параметром $\frac{r'}{r}$:

$$k\sqrt{r^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}' + r'^2} \approx kr \left(1 - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2} \right) = kr - \vec{k}' \cdot \vec{r}', \quad \vec{k}' \equiv k \frac{\vec{r}}{r}, \quad (11.17)$$

а у знаменнику покладемо $|\vec{r} - \vec{r}'| \approx r$. Тоді:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}') = \\ &= \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) + A \frac{e^{ikr}}{r} = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \varphi_{\text{розс.}}(\vec{r}), \quad \text{при } r \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (11.18)$$

Коефіцієнт A перед хвилею, що розходитьсся, називають *амплітудою розсіяння*. Амплітуда розсіяння цілком визначає хвилю, що розходитьсся, на відстанях $r \gg d$ від області дії сил.

Очевидно, що $\hbar\vec{k}'$ можна інтерпретувати як імпульс розсіяної частинки, і тоді кут між \vec{k} і \vec{k}' представляє кут розсіяння θ . Таким чином амплітуда розсіяння залежить від енергії відносного руху та кута між векторами \vec{k} і \vec{k}' і має розмірність довжини:

$$A(E, \theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \varphi_{\vec{k}'} | V | \psi_{\vec{k}} \rangle \quad (11.19)$$

Розрахуємо диференціальний переріз розсіяння, тобто відношення числа частинок, які розсіюються в одиницю часу в тілесний кут $d\Omega$, до щільності потоку падаючих частинок.

Згідно загальним формулам квантової механіки потік ймовірності наступним чином виражається через хвильову функцію

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2\mu i} (\psi^* \nabla \psi - \nabla \psi^* \psi). \quad (11.20)$$

Потік падаючих частинок використовувався для нормування початкової хвильової функції, $\vec{j}_{\text{пад.}} = \frac{\hbar \vec{k}}{\mu}$, а модуль потоку для розсіяної хвилі є

$$|\vec{j}_{\text{розс.}}| = \frac{\hbar}{2\mu i} \left(\varphi_{\text{розс.}}^* \frac{\partial \varphi_{\text{розс.}}}{\partial r} - \varphi_{\text{розс.}} \frac{\partial \varphi_{\text{розс.}}^*}{\partial r} \right) = \frac{\hbar k}{\mu r^2} |A|^2. \quad (11.21)$$

Тоді величина $|\vec{j}_{\text{розс.}}| r^2 d\Omega$ представляє число розсіяних частинок, які пролітають через площадку $ds = r^2 d\Omega$ в одиницю часу. Звідси диференціальний переріз рівний

$$d\sigma = \frac{|\vec{j}_{\text{розс.}}| r^2 d\Omega}{|\vec{j}_{\text{пад.}}|} = \frac{k'}{k} |A(E, \theta)|^2 d\Omega = |A(E, \theta)|^2 d\Omega. \quad (11.22)$$

В останній рівності було використано те, що для пружного розсіяння $k' = k$. Це і є шукана формула для диференціального перерізу пружного розсіяння двох частинок.

11.4. Непружне розсіяння частинок

До цього часу розгляд обмежувався тільки такими процесами розсіяння, коли в результаті взаємодії частинки не змінювали свого складу. Однак дуже часто спостерігаються процеси, в яких частинки змінюють свій склад і, відповідно, масу.

Так, в результаті зіткнення частинки a_1 і a_2 можуть зникнути, а замість них народитися нові b_1 і b_2

$$a_1 + a_2 \rightarrow b_1 + b_2. \quad (11.23)$$

При цьому, звичайно, може бути $m_{a_1} \neq m_{b_1}$, $m_{a_2} \neq m_{b_2}$. Наведемо деякі приклади непружних процесів.

- В результаті зіткнення електрона та позитрона проходить процес їх анігіляції і народжуються два фотона:

$$e^- + e^+ \rightarrow \gamma + \gamma.$$

- При достатньо високих енергіях в результаті зіткнення від'ємно зарядженого π -мезону з протоном утворюються нові частинки, K^0 -мезон та Λ -гіперон:

$$\pi^- + p \rightarrow K^0 + \Lambda.$$

- Електрон з енергією порядку чи більше декількох десятків мегаелектронвольт в процесі розсіяння на ядрі вибиває з останнього протон:

$$e^- + A \rightarrow e^- + A' + p.$$

Зараз займемося розглядом питання опису подібних процесів.

Спершу зауважимо, що при конкретних обчисленнях немає необхідності явно обчислювати функцію Гріна, а зручно використати символічний запис. Розглянемо рівняння Шрьодінгера

$$(E - \hat{H}) \psi = 0, \quad \text{де} \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + V(\vec{r}), \quad (11.24)$$

при цьому $V(\vec{r})$ має обмежений радіус дії d , а $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta$ -

оператор Гамільтона для вільного руху частинки. Формальним розв'язком рівняння (11.24), яке при $r \gg d$ відповідає падаючій

хвилі $\varphi_k \left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right)$, є

$$\psi_{\vec{k}}^- = \varphi_{\vec{k}} + (E - \hat{H}_0)^{-1} V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^-. \quad (11.25)$$

Для того, щоб виділити розв'язки для хвилі, що розходиться, необхідно задати правило обходу полюса в операторі $(E - \hat{H}_0)^{-1}$. Аналогічно тому, як робилося в попередньому розділі, це можна зробити шляхом вводу малої уявної добавки до енергії з наступним спрямуванням її до нуля в кінцевій відповіді

$$\psi_{\vec{k}}^+ = \varphi_{\vec{k}} + (E + i\varepsilon - \hat{H}_0)^{-1} V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^+, \quad (11.26)$$

де $\varepsilon > 0$. Це рівняння називають *рівнянням Ліппмана-Швінгера*.

Хвилі, що сходиться, відповідає інше рівняння, в якому уявна добавка до енергії від'ємна

$$\psi_{\vec{k}}^- = \varphi_{\vec{k}} + (E - i\varepsilon - \hat{H}_0)^{-1} V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^-. \quad (11.27)$$

При цьому вираз

$$G_{\pm}(E) = (E \pm i\varepsilon - \hat{H}_0)^{-1} \quad (11.28)$$

слід розглядати як функції Гріна, що розходяться й сходяться.

Покажемо, що рівняння Ліппмана-Швінгера зводиться до рівняння (11.16). Для цього розкладемо величину $V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^+$ за

$$\begin{aligned} \text{власними функціями } \varphi_{\vec{q}}(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \text{ рівняння} \\ (E_q - \hat{H}_0) \varphi_q = 0. \end{aligned} \quad (11.29)$$

Тоді

$$\begin{aligned} V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) &= \int d^3 r' \delta(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}') = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int d^3 q \varphi_{\vec{q}}(\vec{r}) \int d^3 r' \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}'). \end{aligned} \quad (11.30)$$

Підставляючи цей вираз в рівняння Ліппмана-Швінгера отримаємо

$$\psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) = \varphi_{\vec{q}}(\vec{r}) + \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int d^3 q \frac{\varphi_{\vec{q}}(\vec{r})}{E_k + i\varepsilon - E_q} \int d^3 r' \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}'), \quad (11.31)$$

де $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$, $E_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}$. Інтегруючи далі по d^3q з урахуванням

правила обходу полюсів отримаємо, що рівняння Ліппмана-Швінгера (11.31) співпадає з (11.16).

На основі рівняння Ліппмана-Швінгера легко узагальнити наші результати на випадок непружних реакцій. З цією метою використаємо наступну операторну тотожність

$$\hat{A}^{-1} = \hat{B}^{-1} \left[1 + (\hat{B} - \hat{A}) \hat{A}^{-1} \right], \quad (11.32)$$

і покладемо

$$\hat{A} = E - \hat{H}_0 + i\varepsilon, \quad \hat{B} = E - \hat{H}'_0 + i\varepsilon. \quad (11.33)$$

де \hat{H}'_0 - вільний гамільтоніан кінцевих частинок (він відрізняється від \hat{H}_0 через неспівпадіння мас). Тоді рівняння Ліппмана-Швінгера можна переписати

$$\begin{aligned} \psi_{\bar{k}}^+ &= \varphi_{\bar{k}} + \frac{1}{E - \hat{H}'_0 + i\varepsilon} \left[1 + (\hat{H}_0 - \hat{H}'_0) \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \right] V \psi_{\bar{k}}^+ = \\ &= \varphi_{\bar{k}} + \frac{1}{E - \hat{H}'_0 + i\varepsilon} \left[V \psi_{\bar{k}}^+ + (\hat{H}_0 - \hat{H}'_0) (\psi_{\bar{k}}^+ - \varphi_{\bar{k}}) \right] = \\ &= \psi' + \frac{1}{E - \hat{H}'_0 + i\varepsilon} V' \psi_{\bar{k}}^+, \end{aligned} \quad (11.34)$$

де

$$\begin{aligned} \psi' &= \varphi_{\bar{k}} - \frac{1}{E - \hat{H}'_0 + i\varepsilon} (\hat{H}_0 - \hat{H}'_0) \varphi_{\bar{k}}, \\ V' &= V + \hat{H}_0 - \hat{H}'_0. \end{aligned} \quad (11.35)$$

Початкове рівняння Ліппмана-Швінгера (11.26) можна використовувати для знаходження асимптотики розсіяної хвилі у вхідному каналі, а рівняння (11.35) – в новому каналі. При цьому ψ' буде описувати внутрішній стан і відносний рух вільних частинок у вихідному каналі. Тепер амплітуда розсіяння буде

залежати від квантових чисел γ і γ' в початковому і кінцевому станах

$$A(\vec{k}, \vec{k}'; \gamma, \gamma') = -\frac{\mu'}{2\pi\hbar^2} \langle \phi_{\gamma'}^{k'} | V' | \psi_{k,\gamma}^+ \rangle. \quad (11.36)$$

Повторюючи обчислення попереднього розділу отримаємо для диференціального перерізу

$$d\sigma = \frac{\mu k'}{\mu' k} \left| A(\vec{k}, \vec{k}'; \gamma, \gamma') \right|^2 d\Omega. \quad (11.37)$$

Очевидно, що коли процес пружний, $\gamma = \gamma'$, $\mu = \mu'$, $k = k'$ і формула (11.37) зводиться до (11.22).

11.5. Розрахунок амплітуди розсіяння за теорією збурень

Тепер займемось обчисленням амплітуди розсіяння. Зробимо це лише для пружного розсіяння. З цією метою в праву частину рівняння (11.16) підставимо в якості $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ той самий вираз, який стоїть в правій частині рівняння (11.16)

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = & \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \phi_{\vec{k}}(\vec{r}') + \\ & + \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int d^3r' \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \int d^3r'' \frac{\exp(ik|\vec{r}' - \vec{r}''|)}{|\vec{r}' - \vec{r}''|} V(\vec{r}'') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}''). \end{aligned} \quad (11.38)$$

Далі цю процедуру можна продовжити. Підставляючи в цей вираз розклад (11.17) отримаємо амплітуду розсіяння

$$\begin{aligned} A(E, \theta) = & -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \phi_{\vec{k}'} | V | \phi_{\vec{k}} \rangle + \\ & + \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int d^3r d^3r' \phi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \phi_{\vec{k}}(\vec{r}') + \dots \end{aligned} \quad (11.39)$$

Отриманий ряд називають *борновським рядом*, а його перший член

$$A^{(B)}(E, \theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \varphi_{\vec{k}'} | V | \varphi_{\vec{k}} \rangle \quad (11.40)$$

борновським наближенням. Диференціальний переріз в борновському наближенні має вигляд

$$\frac{d\sigma^{(B)}}{d\Omega} = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \langle \varphi_{\vec{k}'} | V | \varphi_{\vec{k}} \rangle \right|^2. \quad (11.41)$$

У випадку центрально-симетричного поля в (11.40) можна виконати інтегрування по кутовим змінним

$$\begin{aligned} A^{(B)}(E, \theta) &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(r) = \\ &= -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r \frac{\sin qr}{q} V(r). \end{aligned} \quad (11.42)$$

де

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}', \quad \text{а} \quad q \equiv |\vec{q}| = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta} = 2k \sin \frac{\theta}{2}. \quad (11.43)$$



Рис. 19. Макс Борн, зробив значний внесок у розвиток квантової теорії.

Величина $\hbar\vec{q}$ являє собою імпульс, переданий частинці, що розсіюється. В зв'язку з тим, що переданий імпульс і кут розсіяння однозначно зв'язані, часто позначають амплітуду розсіяння не як функцію θ , а як функцію переданого імпульсу $A(E, q)$.

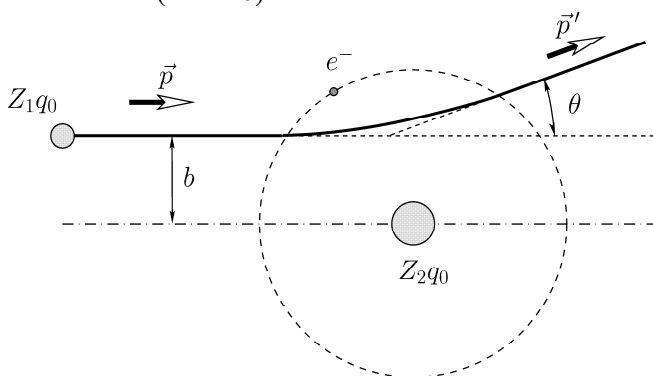
При нульовому переданому імпульсі $q = 0$ амплітуда розсіяння нескінченна, якщо потенціал $V(r)$ зменшується на нескінченності як r^{-1} чи повільніше. Це, зокрема, має місце для кулонівського потенціалу. Тому цей випадок вимагає особливого розгляду, що буде зроблено трохи нижче, а зараз будемо вважати, що потенціал спадає як $r^{-(1+|\epsilon|)}$ або швидше.

Якщо k мале, то q теж мале і $e^{iq\vec{r}} \approx 1$. В цьому випадку амплітуда розсіяння ізотропна і не залежить від енергії. Якщо k велике, то при умові

$$\theta \ll \frac{1}{kd} \quad (11.44)$$

синус в інтегралі (11.42) швидко осцилює і амплітуда розсіяння починає різко падати. Тому при високих енергіях диференціальний переріз різко зростає при малих кутах розсіяння.

Тепер розглянемо розсіяння на кулонівському потенціалі і виведемо формулу Резерфорда з квантової теорії розсіяння. Спочатку відмітимо, що на досліді вивчається не розсіяння на ядрах, а розсіяння на атомах, які є електрично нейтральними частинками (Рис. 20).



Мал. 20. Розсіяння зарядженої частинки на атомному ядрі.

Якщо прицільний параметр $b > r_0$, де r_0 - радіус атома, то розсіяння відбуватись не буде, тому що кулонівське поле ядра буде повністю екрановано електронами. З принципу невизначеностей випливає, що прицільний параметр обмежений нерівністю

$$b > \frac{\hbar}{p'_\perp}, \quad (11.45)$$

де $p'_\perp = p' \sin \theta$ - поперечна складова імпульсу розсіяної частинки. Тому розсіяння буде відбуватись тільки у випадку, коли

$$p' \sin \theta = p \sin \theta \square \frac{\hbar}{r_0}. \quad (11.46)$$

Таким чином, будемо розглядати розсіяння не на кулонівському полі, а на екранованому кулонівському полі

$$V(r, r_0) = Z_1 Z_2 e^2 \frac{e^{-r/r_0}}{r}. \quad (11.47)$$

Обчислимо амплітуду розсіяння на такому потенціалі в борновському наближенні (див. формулу (11.42))

$$\begin{aligned} A^{(b)}(E, \theta) &= -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r \frac{\sin qr}{q} V(r, r_0) = -Z_1 Z_2 e^2 \frac{2\mu}{|\vec{p} - \vec{p}'|^2 + \frac{\hbar^2}{r_0^2}} = \\ &= -Z_1 Z_2 e^2 \frac{2\mu}{4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\hbar^2}{r_0^2}}. \end{aligned} \quad (11.48)$$

У випадку, коли область кутів розсіяння обмежена нерівністю (11.46), в останньому виразі можна покласти $r_0 \rightarrow \infty$ і диференціальний переріз визначається формулою Резерфорда

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2 \mu}{2p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2 = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\mu v^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2. \quad (11.49)$$

Таким чином формулу Резерфорда одержано у рамках борновського наближення. Виявляється, що точний квантовомеханічний розрахунок приводить також до цієї формули. Сам Резерфорд одержав цю формулу з класичних уявлень. Збіг диференціального перерізу, виведеного на основі класичного і квантового підходів, має місце тільки для кулонівського потенціалу.

11.6. Метод парціальних хвиль

Обговоримо більш детально випадок розсіяння на центрально-симетричному потенціалі. У цьому випадку момент кількості руху є інтегралом руху і функцію $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ зручно представити в вигляді суми хвильових функцій з певним орбітальним моментом $\hbar\ell$:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\ell, m} \tilde{\Phi}_{\vec{k}\ell m}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi). \quad (11.50)$$

Далі будемо вибирати вісь z системи координат вздовж хвильового вектора \vec{k} . У цьому випадку задача має аксіальну симетрію і, відповідно, не залежить від кута φ . Це означає, що всі функції $\tilde{\Phi}_{\vec{k}\ell m}(r)$ з $m \neq 0$ слід прирівняти до нуля. Далі, оскільки $Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) \sim P_{\ell}(\cos \theta)$, рівняння (11.50) зведеться до

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \Phi_{k\ell}(r) P_{\ell}(\cos \theta). \quad (11.51)$$

Окремі члени цього ряду називають *парціальними хвилями*. Підставляючи цей вираз в рівняння Шрьодінгера отримаємо

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) + k^2 \right] \Phi_{k\ell}(r) = 0. \quad (11.52)$$

Розглянемо спочатку випадок, коли взаємодію виключено. У цьому випадку хвильовою функцією $\psi_{\vec{k}}(r)$ буде падаюча плоска хвиля $e^{ikr \cos \theta}$, а розв'язки рівняння (11.52) будуть пропорційними сферичним функціям Бесселя першого і другого роду $j_{\ell}(kr)$ і $y_{\ell}(kr)$. Відмітимо, що плоска хвиля не має особливостей, в той час як функції $y_{\ell}(kr)$ мають особливість в точці $r = 0$ [див. (Д.16)]. Тому розклад має вигляд

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta), \quad (11.53)$$

де c_ℓ – деякі коефіцієнти, які потрібно визначити. Для простоти введемо позначення $\rho \equiv kr$ та $u \equiv \cos \theta$. Продиференціюємо праву та ліву частини (11.53) по $d\rho$. В результаті отримаємо

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell j'_\ell(\rho) P_\ell(u) = i \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell j_\ell(\rho) u P_\ell(u). \quad (11.54)$$

Використовуючи властивість поліномів Лежандра (Д.8) і сферичних функцій Бесселя (Д.18) та (Д.19) зведемо (11.54) до наступного рівняння

$$\begin{aligned} & \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell \left[\frac{\ell}{2\ell+1} j_{\ell-1}(\rho) - \frac{\ell+1}{2\ell+1} j_{\ell+1}(\rho) \right] P_\ell(u) = \\ & = i \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{\ell}{2\ell-1} c_{\ell-1} j_{\ell-1}(\rho) + \frac{\ell+1}{2\ell+3} c_{\ell+1} j_{\ell+1}(\rho) \right] P_\ell(u). \end{aligned} \quad (11.55)$$

Звідки випливає рекурентне співвідношення для коефіцієнтів

$$c_{\ell+1} = i \frac{2\ell+3}{2\ell+1} c_\ell. \quad (11.56)$$

Щоб знайти c_0 , розглянемо значення плоскої хвилі в точці $r = 0$. Використовуючи поведінку функцій Бесселя при $\rho \rightarrow 0$ отримаємо, що $c_0 = 1$. Остаточно одержимо, що плоска падаюча хвиля має наступний розклад по парціальним хвилям:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta). \quad (11.57)$$

Таким чином, радіальні парціальні хвилі є

$$\Phi_{k\ell}^{(0)}(r) = (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr). \quad (11.58)$$

Тепер розглянемо поведінку парціальних хвиль при $r \rightarrow \infty$. З цією метою використаємо асимптотичну поведінку функцій Бесселя (Д.17)

$$j_\ell(x) \approx \frac{\sin\left(x - \frac{\pi}{2}\ell\right)}{x}, \quad x \gg 1 \quad (11.59)$$

і отримаємо, що падаюча плоска хвиля (11.57) розпадається на сферичні хвилі, що сходяться і розходяться від центру:

$$\begin{aligned} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) &\approx \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right) P_{\ell}(\cos\theta) = \\ &= \frac{1}{2kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell+1} \left[e^{-i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)} - e^{i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)} \right] P_{\ell}(\cos\theta). \end{aligned} \quad (11.60)$$

Перейдемо тепер до розгляду випадку, коли $V(r) \neq 0$. Будемо цікавитись розв'язком, який при $r \rightarrow \infty$ являє собою суму падаючої плоскої хвилі та сферичної, яка розходиться від центру. Це означає, що в (11.60) необхідно змінити амплітуду у другої експоненти

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &\approx \frac{1}{2kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell+1} \left[e^{-i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)} - S_{\ell} e^{i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)} \right] P_{\ell}(\cos\theta) = \\ &= \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left[i^{\ell} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right) + \frac{i}{2}(1 - S_{\ell}) e^{ikr} \right] P_{\ell}(\cos\theta), \end{aligned} \quad (11.61)$$

при $kr \gg 1$.

Отже, амплітуда розсіяння є

$$A(E, \theta) = \frac{i}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (1 - S_{\ell}) P_{\ell}(\cos\theta). \quad (11.62)$$

Коефіцієнти S_{ℓ} цілком визначають амплітуду розсіяння. Їх називають діагональними елементами *матриці розсіяння* в стані з орбітальним моментом ℓ . Матриця розсіяння залежить від енергії E і в загальному випадку є комплексною величиною.

Діагональні елементи матриці розсіяння можна записати через дійсні величини δ_{ℓ} , які називають *фазовими зсувами*

$$S_{\ell} = e^{2i\delta_{\ell}}. \quad (11.63)$$

У цьому випадку (11.61) можна переписати

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} e^{i\delta_{\ell}} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell + \delta_{\ell}\right) P_{\ell}(\cos\theta) \quad (11.64)$$

і амплітуда розсіяння, записана через фазові зсуви, має вигляд

$$A(E, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}} \sin\delta_{\ell} P_{\ell}(\cos\theta).$$

Тепер легко знайти диференціальний переріз:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{\ell, \ell'} (2\ell+1)(2\ell'+1) P_{\ell}(\cos\theta) P_{\ell'}(\cos\theta) \times \\ \times \sin\delta_{\ell} \sin\delta_{\ell'} \cos(\delta_{\ell} - \delta_{\ell'}).$$

Якщо проінтегрувати його по $d\Omega$, то отримаємо повний переріз

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_{\ell}, \quad (11.65)$$

де

$$\sigma_{\ell} = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell}. \quad (11.66)$$

Останню величину називають *парціальним перерізом*. Очевидно, що парціальний переріз не може перевищувати

$$\sigma_{\ell}^{\max} = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1). \quad (11.67)$$

З іншої сторони, приймаючи до уваги (Д.6), уявна частина амплітуди розсіяння при $\theta = 0$ рівна

$$\text{Im} A(E, 0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell}.$$

Звідси маємо, що

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} A(0). \quad (11.68)$$

Це співвідношення називають *оптичною теоремою*.

Оцінимо які парціальні хвилі приймають участь в розсіянні. Якщо частинка знаходиться поза зоною дії сил ($r > d$), то на неї діють тільки сили центробіжного відштовхування з потенціальною енергією $\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}$. Тому частинка, що має кінетичну енергію E ,

буде “рухатися” на відстанях r , що визначаються нерівністю

$$\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \leq \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = E,$$

або

$$r \geq r_\ell = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{k}.$$

Якщо радіус дії сил $d < r_\ell$, то на відповідні парціальні хвилі потенціал розсіяння не діє і вони не прийматимуть участь в розсіянні. Тобто вклад в розсіяння даватимуть тільки парціальні хвилі з орбітальним квантовим числом ℓ , що визначається з нерівності

$$\sqrt{\ell(\ell+1)} < kd$$

Зокрема, через цю причину при низьких енергіях розсіяння відбувається лише в s -хвилі і диференціальний переріз має сферично-симетричний характер.

11.7. Принцип тотожності частинок в задачі розсіяння

Вищевикладені результати мають сенс тільки в тому випадку, коли частинки, що стикаються, не можна вважати тотожними. Зараз розглянемо, як принцип тотожності змінює результати. Вперше така задача була розглянута Н. Моттом.

11.7.1. Пружне розсіяння частинок з нульовим спіном

Спочатку розглянемо проблему розсіяння двох тотожних частинок з нульовим спіном. Прикладом такого розсіяння може бути розсіяння α -частинки на α -частинці. Згідно загальним принципам квантової теорії хвильова функція двох частинок з цілим спіном має бути симетрична відносно їх перестановки:

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = +\psi(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = +\psi(-\vec{r}).$$

У свою чергу, заміна $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ означає, що $z \rightarrow -z$, а полярний кут $\theta \rightarrow \pi - \theta$. Симетризуємо асимптотичну хвильову функцію відносно цієї заміни:

$$\begin{aligned} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= N \left\{ e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} + \frac{A(E, \theta) + A(E, \pi - \theta)}{r} e^{ikr} \right\} = \\ &= \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) + N \frac{A(E, \theta) + A(E, \pi - \theta)}{r} e^{ikr}, \end{aligned} \quad (11.69)$$

де N – константа нормування, а

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = N \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right)$$

- хвильова функція, що описує систему частинок до зіткнення. Другий член в (11.69) представляє розсіяну хвилю і тому амплітуда розсіяння рівна сумі амплітуд $A(E, \theta)$ і $A(E, \pi - \theta)$:

$$A_{\text{сим}}(E, \theta) = A(E, \theta) + A(E, \pi - \theta).$$

Наявність двох доданків має простий фізичний сенс: при розсіянні тотожних частинок спостерігач у принципі не може відрізнити “прямий” процес (Рис. 21, лівий) від “зворотного” (Рис. 21, правий).

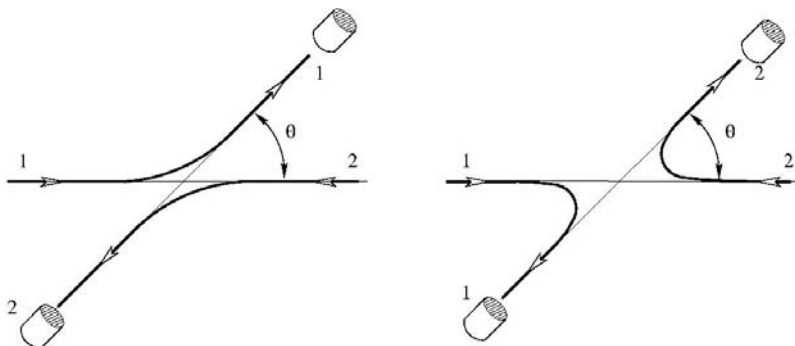


Рис. 21. Розсіяння двох тотожних частинок: пряме і зворотне розсіяння спостерігач не може відрізнити.

В результаті диференціальний переріз розсіяння двох тотожних частинок зі спіном $s = 0$ в елемент тілесного кута $d\Omega$ є

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| A(E, \theta) + A(E, \pi - \theta) \right|^2. \quad (11.70)$$

Звідси видно, що при розсіянні на кут $\theta = 90^\circ$ ефект тотожності частинок збільшує переріз в чотири рази.

В якості прикладу подивимося, як зміниться формула Резерфорда для двох тотожних ядер з нульовим спіном. У випадку кулонівського потенціалу амплітуда розсіяння може бути

розрахована точно (вивід цієї формули ми опускаємо; читач може його знайти, наприклад, в підручнику [2])

$$A(\theta) = \frac{\lambda \Gamma(1+i\lambda) \exp \left[-2i\lambda \ln \left(\sin \frac{\theta}{2} \right) \right]}{2k\Gamma(1-i\lambda) \sin^2 \frac{\theta}{2}},$$

де $\lambda = \frac{Z^2 e^2}{\hbar v}$, а v - відносна швидкість частинок. Підставляючи цей вираз в формулу (11.70) отримаємо *формулу Мотта*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z^2 e^2}{2\mu v^2} \right)^2 \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\theta}{2}} - 2 \frac{\cos \left[\lambda \ln \left(\operatorname{tg}^2 \frac{\theta}{2} \right) \right]}{\sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}} \right\}. \quad (11.71)$$

Її перший член відповідає формулі Резерфорда, другий дає розсіяння на кут $\pi - \theta$, а третій пов'язаний з ефектом тотожності і не має аналогів в класичній механіці. Якщо $\hbar \rightarrow 0$, то $\cos \left[\lambda \ln \left(\operatorname{tg}^2 \frac{\theta}{2} \right) \right]$ починає швидко осцилювати і погашається,

будучи проінтегрованим по малому тілесному куту. Таким чином, в формулі Мотта (11.71) третій член зникає при переході до класичної границі.

11.7.2. Пружне розсіяння двох частинок зі спіном 1/2

Переходячи до задачі про розсіяння двох тотожних частинок зі спіном 1/2 будемо нехтувати спін-орбітальною взаємодією. Тоді повний спін системи S буде інтегралом руху і в хвильовій функції можна розділити спінові і координатні змінні. Таким чином отримуємо, що симетрія координатної частини хвильової функції залежить від симетрії її спінової частини.

Якщо повний спін $S = 0$ (синглетний стан), то спінова частина хвильової функції антисиметрична. Відповідно координатна частина буде симетрична. В результаті для перерізу

будемо мати такий самий вираз (11.69), що і для розсіяння двох частинок зі спіном нуль.

У випадку, коли спінова частина симетрична (повний спін $S=1$, триплетний стан), то координатна частина має бути антисиметричною відносно заміни $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Тоді формула для асимптотичної хвильової функції буде

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}, S=1}(\vec{r}) &= N \left(e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} + \frac{A(E, \theta) - A(E, \theta)}{r} e^{ikr} \right) = \\ &= \varphi_{\vec{k}, S=1}(\vec{r}) + N \frac{A(E, \theta) - A(E, \theta)}{r} e^{ikr}. \end{aligned}$$

Тобто в цьому випадку амплітуда розсіяння являє собою різницю амплітуд розсіяння “вперед” і “назад”

$$A_{S=1}(E, \theta) = A(E, \theta) - A(E, \pi - \theta).$$

Відповідно диференціальний переріз буде

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S=1} = |A(E, \theta) - A(E, \pi - \theta)|^2.$$

Відмітимо, що при $\theta = 90^\circ$ цей диференціальний переріз перетворюється в нуль.

Тепер розглянемо випадок, коли розсіюються дві тотожні неполяризовані частинки зі спіном $\frac{1}{2}$. У цьому випадку необхідно усереднити по всім спіновим станам початкових частинок. Оскільки кожна з частинок може знаходитись в двох різних спінових станах, то всього є 4 спінові стани $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$ і $|\downarrow\downarrow\rangle$. З них тільки одна комбінація

$$|S=0, S_3=0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

антисиметрична і відповідає значенню повного моменту $S=0$. Інші три стани

$$|S=1, S_3=1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle,$$

$$|S = 1, S_3 = 0\rangle = \frac{\sqrt{1}}{2} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle),$$

$$|S = 1, S_3 = -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

симетричні і відповідають значенню $S = 1$. Таким чином в триплетному стані частинки знаходяться з ймовірністю в три рази більшою, ніж в синглетному. Для розрахунку перерізу неполяризованих частинок необхідно відповідні перерізи скласти помноженими на їх ймовірності

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S=0} + \frac{3}{4} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S=1} =$$

$$= |A(E, \theta)|^2 + |A(E, \pi - \theta)|^2 - \Re[A^*(E, \theta) A(E, \pi - \theta)].$$

Отже, принцип тотожності вагомим чином впливає на розсіяння. Зокрема, загальною властивістю при розсіянні тотожних частинок є симетрія “вперед-назад” диференціального перерізу, тобто рівність перерізів при кутах θ і $\pi - \theta$.

Задачі

11.1. У борновському наближенні розрахувати диференційний переріз для розсіяння на потенціалі сферичної сходинок

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & \text{при } r < r_0, \\ 0, & \text{при } r > r_0. \end{cases}$$

Як залежить від кута розсіяння диференційний перетин при значеннях $qr_0 \ll 1$ та $qr_0 \gg 1$, де q визначається у (11.43)?

11.2. Для потенціалу сферичної сходинок (Задача 11.1) знайти фазовий зсув для парціальної s -хвилі.

РОЗДІЛ 12. ОСНОВИ РЕЛЯТИВІСТСЬКОЇ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

12.1. Рівняння Клейна-Гордона-Фока

При переході до релятивістської квантової механіки ми зустрічаємось з рядом нових явищ, які відсутні в нерелятивістській квантовій механіці. Перш за все це процесами народження частинок. Нагадаємо, що нерелятивістська механіка має місце у випадку, коли кінетична енергія частинок $T \ll mc^2$. Однак якщо намагатися локалізувати частинку в області, лінійні розміри якої менші комптонівської довжини хвилі $\lambda_{\text{Ком}} = \hbar / (2mc)$, то з принципу невизначеностей частинка буде мати кінетичну енергію $T > 2mc^2$, тобто стане суттєво релятивістською. Причому її енергії буде достатньо, щоб народити пару частинка-античастинка. Звідси, на відстанях менше комптонівської довжини хвилі стає принципово неможливим говорити про окрему частинку і потрібно враховувати процеси віртуального народження і знищення пар.

Почнемо знайомство з релятивістською квантовою механікою з прикладу вільної частинки зі спіном нуль. Перш за все зазначимо, що нерелятивістське рівняння Шрьодінгера для вільної частинки

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{x}, t) \quad (12.1)$$

можна отримати з нерелятивістського співвідношення

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (12.2)$$

шляхом формальної заміни енергії та імпульсу на оператори

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}, \quad (12.3)$$

що діють на хвильову функцію частинки.

Тепер розглянемо релятивістське співвідношення

$$\frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2 \quad (12.4)$$

і зробимо в ньому таку саму заміну. В результаті отримаємо рівняння

$$\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t^2} - \hbar^2 \Delta \Psi(\vec{x}, t) + m^2 c^2 \Psi(\vec{x}, t) = 0, \quad (12.5)$$

яке називається *рівнянням Клейна-Гордона-Фока* (КГФ).

12.1.1 Релятивістськи-інваріантний запис рівняння Клейна-Гордона-Фока

Запишемо рівняння КГФ в релятивістсько-інваріантному вигляді. Для цього введемо контраваріантний і коваріантний 4-вектори імпульсу:

$$p^\mu = (p^0, p^1, p^2, p^3) = \left(\frac{E}{c}, p^1, p^2, p^3 \right) \equiv \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right),$$

$$p_\mu = (p_0, p_1, p_2, p_3) = \left(\frac{E}{c}, -p^1, -p^2, -p^3 \right) \equiv \left(\frac{E}{c}, -\vec{p} \right) \quad (12.6)$$

і перепишемо через них співвідношення (12.4). В результаті отримаємо

$$\sum_{\mu=0}^3 p^\mu p_\mu \equiv p^\mu p_\mu = m^2 c^2. \quad (12.7)$$

Тут і далі вважається, що по коваріантному і контраваріантному індексам, які повторюються, відбувається сумування і знак суми по ним опущено. На відміну від індексу, який позначає компоненту звичайного тривимірного вектора (його, як і раніше будемо позначати малими латинськими літерами i, j, k, \dots), малі грецькі індекси будуть позначати компоненти вектора з простору Мінковського.

Коваріантний і контраваріантний вектори пов'язані співвідношенням

$$A_\mu = g_{\mu\nu} A^\nu, \quad (12.8)$$

де g – метричний тензор простору Мінковського

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (12.9)$$

Зауважимо, що саме скалярний добуток $A_\mu B^\mu$ коваріантного 4-вектора з контрваріантним 4-вектором не змінюється при Лоренц-перетвореннях.

Визначимо коваріантний і контрваріантний 4-вектори координати:

$$\begin{aligned} x^\mu &= (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x^1, x^2, x^3) \equiv (ct, \vec{x}), \\ x_\mu &= (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, x_1, x_2, x_3) \equiv (ct, -\vec{x}). \end{aligned} \quad (12.10)$$

Аналогічно можна ввести оператори, які мають структуру 4-вимірних контрваріантного і коваріантного векторів,

$$\begin{aligned} \hat{p}^\mu &= \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^3} \right) = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \equiv \\ &\equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} \equiv i\hbar \nabla^\mu, \\ \hat{p}_\mu &= \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_3} \right) = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x^1}, -\frac{\partial}{\partial x^2}, -\frac{\partial}{\partial x^3} \right) \equiv \\ &\equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \equiv i\hbar \nabla_\mu \end{aligned} \quad (12.11)$$

Очевидно, що їх слід розглядати як оператори релятивістського (контрваріантного і коваріантного) імпульсу. Тоді з принципу відповідності випливає, що релятивістське співвідношення між 4-імпульсом і масою частинки (12.7) в квантовому випадку приймає вигляд наступного рівняння

$$\left[\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu - (mc)^2 \right] \Psi(x) = 0. \quad (12.12)$$

Підставляючи сюди явний вираз для операторів імпульсу (12.11) переконуємось, що це і є рівняння КГФ.

12.1.2 Плосько-хвильові розв'язки рівняння

Відмітимо, що на відміну від рівняння Шрьодінгера отримане рівняння є рівнянням другого порядку по часовій похідній. Це означає, що для знаходження розв'язку потрібно задати крім значення хвильової функції в початковий момент часу, $\Psi(\vec{x}, t = 0)$, ще й значення швидкості зміни хвильової функції, $\partial\Psi(\vec{x}, t = 0)/\partial t$. Зясуємо, до яких наслідків приведе ця обставина.

З цією метою отримаємо рівняння неперервності. Це зробимо таким чином. Помножимо зліва рівняння КГФ (12.5) на $\Psi^*(\vec{x}, t)$:

$$\Psi^* \left[\hbar^2 \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \hbar^2 \Delta \right] \Psi = -m^2 c^2 |\Psi|^2. \quad (12.13)$$

Далі візьмемо рівняння, спряжене до рівняння КГФ, і помножимо його зліва на $\Psi(\vec{x}, t)$:

$$\Psi \left[\left(\hbar^2 \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \hbar^2 \Delta \right) \Psi \right]^* = -m^2 c^2 |\Psi|^2. \quad (12.14)$$

Після цього віднімемо це рівняння від (12.13). В результаті отримаємо

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) - \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = 0. \quad (12.15)$$

Вводячи позначення

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right), \quad (12.16)$$

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$

перепишемо (12.15) в вигляді

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0. \quad (12.17)$$

Проте, незважаючи на те, що це рівняння зовнішно схоже на рівняння неперервності, яке має місце в нерелятивістській

квантовій механіці, його не можна інтерпретувати як рівняння неперервності для густини ймовірності. Річ в тім, що $\rho(\vec{x}, t)$ виявляється не позитивно-визначеною величиною і, відповідно, не може бути інтерпретована як густина ймовірності. В цьому переконаємося, знаходячи явний розв'язок рівняння КГФ.

Для того, щоб розв'язувати рівняння (12.5) запишемо його розв'язок у вигляді плоских хвиль

$$\Psi(\vec{x}, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - \varepsilon t) \right]. \quad (12.18)$$

Підставляючи цей вираз в рівняння КГФ (12.5) отримаємо рівняння для ε

$$\varepsilon^2 = m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2, \quad (12.19)$$

або

$$\varepsilon = \pm \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2} = \pm E_{\vec{p}}, \quad (12.20)$$

де $E_{\vec{p}} > 0$ слід розглядати як енергію частинки.

У результаті маємо два розв'язки:

$$\Psi^{(+)}(\vec{x}, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - E_p t) \right], \quad (12.21)$$

$$\Psi^{(-)}(\vec{x}, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} + E_p t) \right], \quad (12.22)$$

які відрізняються новим квантовим числом $\eta = \varepsilon/E_{\vec{p}} = \pm 1$. В залежності від його знаку будемо називати відповідний розв'язок додатно- та від'ємно-частотним розв'язком. Для того, щоб придати фізичну інтерпретацію отриманим розв'язкам підставимо (12.21) і (12.22) в вираз для щільності $\rho(\vec{x}, t)$. В результаті отримаємо, що для додатно-частотних розв'язків щільність позитивна, а для від'ємно-частотних розв'язків вона від'ємно визначена:

$$\begin{aligned} \rho^{(+)}(\vec{x}, t) &= \frac{E_{\vec{p}}}{mc^2} \left| \Psi^{(+)}(\vec{x}, t) \right|^2, \\ \rho^{(-)}(\vec{x}, t) &= -\frac{E_{\vec{p}}}{mc^2} \left| \Psi^{(-)}(\vec{x}, t) \right|^2. \end{aligned} \quad (12.23)$$

Проте рівнянню (12.17) можна придати новий фізичний зміст. З цією метою помножимо густину (12.32) на елементарний заряд e і будемо надалі вважати її щільністю електричного заряду:

$$\begin{aligned}\rho^{(+)}(\vec{x}, t) &= e \frac{E_{\vec{p}}}{mc^2} \left| \Psi^{(+)}(\vec{x}, t) \right|^2, \\ \rho^{(-)}(\vec{x}, t) &= -e \frac{E_{\vec{p}}}{mc^2} \left| \Psi^{(-)}(\vec{x}, t) \right|^2.\end{aligned}\tag{12.24}$$

Відповідно електричним струмом будемо називати величини

$$\begin{aligned}\vec{j}^{(+)}(\vec{x}, t) &= e \frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{E_{\vec{p}}}{mc^2} \left| \Psi^{(+)}(\vec{x}, t) \right|^2, \\ \vec{j}^{(-)}(\vec{x}, t) &= -e \frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{E_{\vec{p}}}{mc^2} \left| \Psi^{(-)}(\vec{x}, t) \right|^2.\end{aligned}\tag{12.25}$$

Тоді рівняння неперервності (12.17) можна інтерпретувати як рівняння неперервності для електричного струму, а додатно- і від'ємно-частотні розв'язки розглядати як розв'язки для частинки і античастинки. Відмітимо, що згідно (12.25) імпульс античастинки \vec{p}' слід розглядати як величину рівну по абсолютному значенню імпульсу частинки, але направлену в протилежну сторону до нього, $\vec{p}' = -\vec{p}$.

Для того, щоб картина була повною, слід показати, що в нерелятивістському наближенні рівняння КГФ зводиться до рівняння Шрьодінгера. З цією метою зробимо заміну

$$\Psi(\vec{x}, t) = \exp\left(-\frac{imc^2 t}{\hbar}\right) \varphi(\vec{x}, t)\tag{12.26}$$

і обчислимо другу похідну від хвильової функції по часу:

$$\frac{\partial^2 \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t^2} = \exp\left(-\frac{imc^2 t}{\hbar}\right) \left[\frac{\partial^2 \varphi(\vec{x}, t)}{\partial t^2} - 2i \frac{mc^2}{\hbar} \frac{\partial \varphi(\vec{x}, t)}{\partial t} - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \varphi(\vec{x}, t) \right].\tag{12.27}$$

Трохи нижче побачимо, що $\varphi(\vec{x}, t)$ грає роль нерелятивістської хвильової функції. Тому

$$\left| \frac{\partial^2 \phi(\vec{x}, t)}{\partial t^2} \right| \sim \frac{T}{\hbar} \left| \frac{\partial \phi(\vec{x}, t)}{\partial t} \right| \square \left| \frac{T}{\hbar} \right|^2, \quad (12.28)$$

де T - кінетична енергія частинки. Тоді в нерелятивістському наближенні можна знехтувати першим членом в квадратних дужках рівності (12.27) в порівнянні з другим і третім членами

$$\frac{\partial^2 \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t^2} \approx \exp\left(-\frac{imc^2 t}{\hbar}\right) \left[-2i \frac{mc^2}{\hbar} \frac{\partial \phi(\vec{x}, t)}{\partial t} - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \phi(\vec{x}, t) \right]. \quad (12.29)$$

Підставляючи цей вираз в рівняння КГФ отримаємо рівняння Шрьодінгера для вільної частинки:

$$i\hbar \frac{\partial \phi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\vec{x}, t). \quad (12.30)$$

В кінці відмітимо, що хвильова функція $\Psi(x)$, яка є розв'язком рівняння КГФ, не змінюється при поворотах на довільні кути в чотиривимірному просторі (неперервні перетворення)

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x') = \Psi(x), \text{ де } x'_\mu = a_\mu^\nu x_\nu, \quad a_\mu^\nu a_\nu^\sigma = \delta_\mu^\sigma. \quad (12.31)$$

Виявляється, що особливості перетворення хвильової функції при таких перетвореннях тісно пов'язані зі спіном частинки, яку описує рівняння. Для нашого випадку спін виявляється рівним нулю. При дискретному перетворенні інверсії

$$\vec{x} \rightarrow -\vec{x}, \quad t \rightarrow t$$

хвильова функція або не змінюється, або змінює знак. В такому випадку говорять, що функція $\Psi(x)$ описує скалярну або псевдоскалярну частинку. В якості прикладу псевдоскалярних частинок можна навести π - і K - мезони.

12.2. Рівняння Дірака

12.2.1. Обґрунтування рівняння

Тепер спробуємо побудувати релятивістське рівняння у вигляді рівняння Шрьодінгера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (12.32)$$

тобто у вигляді рівняння першого порядку по часовій похідній. Через те, що в релятивістському випадку координата і час виступають на рівних, оператор Гамільтона також повинен бути лінійним і по просторовим похідним. Тому пишемо

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) + \beta mc^2 \Psi, \quad (12.33)$$

де $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ і β - деякі, поки що невідомі, коефіцієнти.

Тепер знайдемо обмеження на коефіцієнти $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ і β . З цією слід вимагати, щоб розв'язки рівняння (12.33) задовольняли також рівняння КГФ. Для цього візьмемо похідну по часу від лівої і правої частин рівняння (12.33):

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} &= \left[\frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \right) + \beta mc^2 \right] \times \\ &\times \left[\frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) + \beta mc^2 \Psi \right] = \\ &= -\frac{(\hbar c)^2}{2} \sum_{i,j=1}^3 (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^i \partial x^j} + \frac{\hbar^2 c^3 m}{i} \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \frac{\partial \Psi}{\partial x^i} + \\ &+ \beta^2 m^2 c^4 \Psi. \end{aligned} \quad (12.34)$$

Для того, щоб отримане рівняння співпадало з рівнянням КГФ необхідно накласти наступні обмеження на коефіцієнти:

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij}, \quad (12.35)$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0, \quad (12.36)$$

$$\beta^2 = 1. \quad (12.37)$$

В цьому випадку розв'язки рівняння (12.33) будуть також задовольняти і рівнянню КГФ. Відмітимо, що зворотнє твердження може і не виконуватися.

Очевидно, що звичайні комплексні числа не можуть задовольняти співвідношенням (12.35)-(12.37). Тому коефіцієнти $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ і β слід вважати матрицями. Вони називаються *матрицями Дірака*, а саме рівняння (12.33) - *рівнянням Дірака*.

З'ясуємо, які властивості повинні мати матриці Дірака:

(1). $\vec{\alpha}$ і β повинні бути ермітовими. Це випливає з вимоги ермітовості гамільтоніана $\hat{H} = i\hbar c\vec{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2$.

(2). Власні значення матриць $\vec{\alpha}$ і β повинні бути рівні ± 1 . Це відразу випливає з (12.35) і (12.37).

(3). Слід $\vec{\alpha}$ і β матриць рівний нулю. Дійсно з (12.36) і (12.37) отримуємо:

$$\text{Tr}(\alpha_i) = -\text{Tr}(\beta\alpha_i\beta) = -\text{Tr}(\alpha_i\beta^2) = -\text{Tr}(\alpha_i), \quad (12.38)$$

тобто $\text{Tr}(\alpha_i) = 0$. Аналогічно отримуємо, що $\text{Tr}(\beta) = 0$.

(4). Матриці Дірака повинні мати парну розмірність. Дійсно, з властивості (2) випливає, що в діагональному представленні у матриці α_i по діагоналі стоять тільки +1 або -1. Тоді для того, щоб слід матриці був рівний нулю (властивість (3)), необхідно, щоб на її діагоналі стояло однакове число +1 і -1. Іншими словами, матриця повинна мати парне число рядків і стовпчиків.

Розмірність матриць 2×2 не підходить, тому що там є тільки три антикомутуючі матриці, матриці Паулі. Однак починаючи з розмірності 4×4 такі матриці можуть бути знайдені. Зокрема, підходить набір, який у блочному вигляді (через матриці розмірності 2×2) виглядає як

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}. \quad (12.39)$$

Тут σ_i – матриці Паулі, а $\mathbf{1}$ – одинична 2×2 матриця. При цьому хвильова функція представляє собою чотиривимірну матрицю-стовпчик

$$\Psi(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{x}, t) \\ \Psi_2(\vec{x}, t) \\ \Psi_3(\vec{x}, t) \\ \Psi_4(\vec{x}, t) \end{pmatrix}. \quad (12.40)$$

Вона називається *діраковським спінором*. Ермітово-спряжений діраковський спінор представляє собою чотиривимірну матрицю-рядок

$$\Psi^+(\vec{x}, t) = (\Psi_1^*(\vec{x}, t), \Psi_2^*(\vec{x}, t), \Psi_3^*(\vec{x}, t), \Psi_4^*(\vec{x}, t)). \quad (12.41)$$

12.2.2. Рівняння неперервності

Помножимо зліва рівняння Дірака (12.33) на Ψ^+ :

$$\Psi^+ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \Psi^+ (\vec{\alpha} \cdot \nabla \Psi) + mc^2 \Psi^+ \beta \Psi. \quad (12.42)$$

Тепер виконаємо ермітове спряження рівняння Дірака (12.33) і помножимо отримане рівняння справа на Ψ :

$$-\frac{\partial \Psi^+}{\partial t} i\hbar \Psi = -\frac{\hbar c}{i} (\nabla \Psi^+ \cdot \vec{\alpha}) \Psi + mc^2 \Psi^+ \beta \Psi. \quad (12.43)$$

Віднімаючи від рівняння (12.42) рівняння (12.43) одержимо

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi) = -c \nabla \cdot (\Psi^+ \vec{\alpha} \Psi). \quad (12.44)$$

Вводячи позначення для густини заряду і струму

$$\rho(\vec{x}, t) = q(\Psi^+ \Psi) \quad \text{і} \quad \vec{j}(\vec{x}, t) = qc(\Psi^+ \vec{\alpha} \Psi) \quad (12.45)$$

(q - заряд частинки) бачимо, що рівняння (12.44) можна інтерпретувати як рівняння неперервності:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) = \text{div} \vec{j}(\vec{x}, t). \quad (12.46)$$

Для того, щоб пояснити таку трактовку, обчислимо оператор швидкості діраковської частинки:

$$\hat{v} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \vec{x}] = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hbar c}{i} \vec{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2, \vec{x} \right] = c \vec{\alpha}. \quad (12.47)$$

Власні значення цієї величини, які згідно властивості (2) матриць Дірака, рівні $\pm c$, варто розглядати як власні значення миттєвої швидкості. Більш того, легко бачити, що

$$[\hat{H}, \hat{v}] = c [\hat{H}, \vec{\alpha}] \neq 0 \quad (12.48)$$

і, як наслідок, неможливо одночасно виміряти енергію і миттєву швидкість частинки Дірака.

При цьому струм виражається не через миттєву швидкість, а через середнє значення швидкості:

$$\vec{j} = qc\Psi^+ \hat{\alpha} \Psi = q\Psi^+ \hat{v} \Psi = q\langle \vec{v} \rangle. \quad (12.49)$$

Далі побачимо, що середня швидкість виявляється $|\langle \vec{v} \rangle| < c$. В результаті рух частинки Дірака можна розглядати як дрижання зі швидкістю світла навколо траєкторії, по якій рухається частинка з середньою швидкістю.

12.2.3. Релятивістськи-інваріантна форма рівняння Дірака

Щоб записати рівняння Дірака в інваріантній формі, зручно перейти від матриць β і $\vec{\alpha}$ до так званих γ -матриць

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta\alpha_i \quad (12.50)$$

і, якщо розглядати γ^μ як контрваріантний вектор, рівняння Дірака приймає явно релятивістськи-інваріантний вид

$$i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi(x) - mc\Psi(x) = 0. \quad (12.51)$$

Властивості γ -матриць також приймають коваріантний характер

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}. \quad (12.52)$$

В блочній формі γ -матриці мають вид

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (12.53)$$

Вводячи позначення

$$p_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad (12.54)$$

рівняння (12.51) записується як

$$(\not{\partial} - mc)\Psi(x) = 0, \quad \text{де } \not{\partial} \equiv \gamma^\mu p_\mu. \quad (12.55)$$

В нових позначеннях рівняння неперервності також приймає релятивістськи-інваріантний вид

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu = 0, \quad (12.56)$$

де

$$j^\mu = (c\rho, \vec{j}) = c\Psi^+\gamma^0\gamma^\mu\Psi = c\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi. \quad (12.57)$$

Тут і далі $\bar{\Psi} = \Psi^+\gamma^0 = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, -\Psi_3^*, -\Psi_4^*)$. Цей об'єкт будемо називати *діраково-спряженим спінором*.

12.2.4. Коваріантні структури в теорії Дірака

Величину $\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi$ варто розглядати як контраваріантний 4-вектор. Відповідно $\bar{\Psi}\gamma_\mu\Psi$, де $\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu$, варто розглядати як коваріантний 4-вектор. Які ще коваріантні структури існують в теорії Дірака? З цією метою побудуємо всі можливі лінійно-незалежні добутки γ -матриць. В таких добутках існує 16 лінійно-незалежних матриць

$$\Gamma^S = 1, \quad \Gamma_\mu^V = \gamma_\mu, \quad \Gamma^P = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \equiv \gamma_5 \equiv \gamma^5, \quad (12.58)$$

$$\Gamma_{\mu\nu}^T = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu] \equiv \sigma_{\mu\nu}, \quad \Gamma_\mu^A = \gamma_5\gamma_\mu.$$

Легко встановити, що матриці Γ характеризуються наступними властивостями

1. $(\Gamma^n)^2 = \pm 1$.

2. Безпосередньою перевіркою можна встановити, що

$$\text{Tr } \Gamma^n \Gamma^m = \pm 4\delta^{nm}. \quad (12.59)$$

Легко довести лінійну незалежність матриць Γ . Дійсно, припустимо

$$\sum_{n=1}^{16} c_n \Gamma^n = 0. \quad (12.60)$$

Помноживши праву і ліву частини цього співвідношення на Γ^m , обчисливши слід і використавши (12.59) відразу отримаємо, що $c_m = 0$.

Тепер розглянемо наступні величини

$$\begin{aligned}
S &= \bar{\Psi}(x)\Gamma^S\Psi(x), \quad V_\mu = \bar{\Psi}(x)\Gamma_\mu^V\Psi(x), \\
P &= \bar{\Psi}(x)\Gamma^P\Psi(x), \quad T_{\mu\nu} = \bar{\Psi}(x)\Gamma_{\mu\nu}^T\Psi(x), \\
A &= \bar{\Psi}(x)\Gamma_\mu^A\Psi(x).
\end{aligned}
\tag{12.61}$$

З'ясовано, що при перетвореннях Лоренца вони перетворюються як скаляр (S), вектор (V_μ), псевдоскаляр (P), тензор другого рангу ($T_{\mu\nu}$) і псевдовектор (A_μ). Цими величинами вичерпуються всі можливі коваріантні структури в теорії Дірака.

12.2.5. Розв'язок для вільної діраковської частинки в системі спокою

Розглянемо випадок, коли частинка знаходиться в спокої

$$\hat{p}\Psi(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \Psi(\vec{x}, t) = 0,
\tag{12.62}$$

тобто хвильова функція не залежить від просторової координати і рівняння Дірака зводиться до

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(t) = \beta mc^2 \Psi_0(t).
\tag{12.63}$$

Записуючи

$$\Psi_0(t) = \exp\left(-\frac{i\eta mc^2}{\hbar} t\right) \omega
\tag{12.64}$$

знаходимо, що рівняння (12.63) представляє рівняння на власні значення β – матриці

$$\eta\omega = \beta\omega.
\tag{12.65}$$

З властивостей матриць Дірака відразу випливає, що

$$\eta = \pm 1.
\tag{12.66}$$

При цьому дві власні функції відповідають значенням квантового числа $\eta = +1$

$$\omega^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{і} \quad \omega^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (12.67)$$

і ще дві відповідають значенням квантового числа $\eta = -1$

$$\omega^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{і} \quad \omega^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (12.68)$$

Розв'язкам (12.67) можна придати зміст хвильової функції частинки з енергією $E = \eta mc^2 = mc^2$, а два розв'язки інтерпретувати як два спінових стани з проєкціями спіну $s = +1/2$ і $s = -1/2$, відповідно. Однак розв'язки (12.68) формально відповідають частинці з від'ємною енергією $E = \eta mc^2 = -mc^2$. Їх інтерпретацію розглянемо трохи далі. Зараз тільки відмітимо, що подолання перешкод надання фізичної інтерпретації розв'язкам (12.68) з від'ємною енергією приводить до дуже важливих фізичних висновків.

12.2.6. Нерелятивістське наближення для рівняння Дірака

Займемось дослідженням розв'язків з позитивною енергією і покажемо, що для них рівняння Дірака зводиться в нерелятивістському наближенні до рівняння Паулі.

Спочатку введемо взаємодію діраковської частинки з електромагнітним полем. Надалі вважатимемо, що діраковська частинка це електрон, тому $q = -e$. Щоб ввести взаємодію будемо виходити з принципу калібровочної інваріантності, яка була розглянута в Розділі 7.3. Взаємодія повинна бути введена так, щоб рівняння залишились незмінними при наступних перетвореннях хвильової функції $\Psi(\vec{x}, t)$ і вектор-потенціалу $A_\mu(\vec{x}, t)$

$$\Psi(\vec{x}, t) \rightarrow \Psi'(\vec{x}, t) = \exp\left[-i \frac{q}{\hbar c} f(\vec{x}, t)\right] \Psi(\vec{x}, t), \quad (12.69)$$

$$A_\mu(\vec{x}, t) \rightarrow A'_\mu(\vec{x}, t) + \frac{\partial}{\partial x^\mu} f(\vec{x}, t), \quad A^\mu = (c\Phi, \vec{A}).$$

де $f(\vec{x}, t)$ – довільна функція 4-координати $x^\mu = (ct, \vec{x})$.

Це можна зробити, якщо замінити 4-імпульс відповідно

$$p^\mu \rightarrow p^\mu + \frac{e}{c} A^\mu. \quad (12.70)$$

Тоді рівняння Дірака перетвориться на

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta mc^2 + q\Phi \right] \Psi. \quad (12.71)$$

Таким чином гамільтоніан приймає вигляд

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{вз.}}, \\ \hat{H}_0 &= c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2, \\ \hat{H}_{\text{вз.}} &= e\vec{\alpha} \cdot \vec{A} - e\Phi = \frac{e}{c} \hat{v} \cdot \vec{A} - e\Phi. \end{aligned} \quad (12.72)$$

Для подальшого аналізу зручно записати хвильову функцію $\Psi(\vec{x}, t)$ через пару двокомпонентних спінорів

$$\Psi = \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}. \quad (12.73)$$

Тоді рівняння Дірака в зовнішньому електромагнітному полі приймає вигляд системи двох рівнянь

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi} = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \tilde{\chi} - e\Phi \tilde{\phi} + mc^2 \tilde{\phi}, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\chi} = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \tilde{\phi} - e\Phi \tilde{\chi} - mc^2 \tilde{\chi}, \end{cases} \quad (12.74)$$

де $\vec{\pi} \equiv \hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A}$ слід розглядати як імпульс діраковської частинки у зовнішньому електромагнітному полі.

Аналогічно тому, як це було у випадку рівняння КГФ, зробимо заміну

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = \exp\left(-i \frac{mc^2}{\hbar} t\right) \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (12.75)$$

після чого система рівнянь (12.74) перетвориться у

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \chi - e\Phi \phi, \\ 2mc^2 \chi + e\Phi \chi + i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \phi. \end{cases} \quad (12.76)$$

Нехтуючи в другому рівнянні членами $-e\Phi \chi + i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}$ в порівнянні з $2mc^2 \chi$, отримаємо

$$\chi = \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc^2} \phi. \quad (12.77)$$

В результаті в першому рівнянні системи (12.76) можна виключити χ

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} - e\Phi \right] \phi. \quad (12.78)$$

Розпишемо вираз $(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2$ більш докладно, використовуючи властивість матриць Паулі (4.39)

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 &= \sum_{i,j=1}^3 \left(\delta_{ij} + i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \sigma_k \right) \left(\hat{p}_i + \frac{e}{c} A_i \right) \left(\hat{p}_j + \frac{e}{c} A_j \right) = \\ &= \left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - i \left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \times \left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \cdot \vec{\sigma}. \end{aligned} \quad (12.79)$$

Далі

$$\begin{aligned} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \times \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) &= -\frac{q}{c} \left([\vec{p} \times \vec{A}] + [\vec{A} \times \vec{p}] \right) = \\ &= \frac{\hbar e}{i c} \text{rot } \vec{A} = \frac{\hbar e}{i c} \vec{B}. \end{aligned}$$

В результаті рівняння (12.79) перетвориться в рівняння Паулі з правильним значенням магнітного моменту електрона

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m} + \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} - e\Phi \right] \phi. \quad (12.80)$$

Таким чином теорія Дірака дозволяє розрахувати магнітний момент електрона, який в рівнянні Паулі вводився феноменологічно.

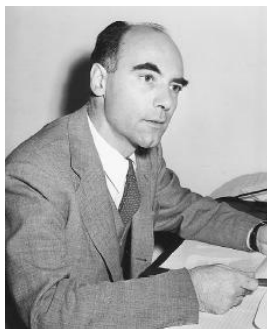


Рис. 22. П.Дірак (ліворуч), написав релятивістське рівняння для електрона. На його основі було передбачено існування позитрона. К.Андерсон (праворуч) встановив існування позитрона експериментально.

Наступний порядок розкладу системи (12.76) по степеням v/c дає квазірелятивістські поправки. Зокрема, в цьому порядку виникає спин-орбітальна взаємодія в атомі.

12.2.7. Інтерпретація розв'язків з від'ємною енергією. Відкриття позитрона

Не зважаючи на блискучий опис багатьох фізичних явищ (розрахунок магнітного моменту електрона, релятивістських поправок до спектра атома водню та ін.) теорія Дірака потребує пояснення розв'язків з від'ємною енергією. З цією метою Дірак був змушений сформулювати свою теорію фізичного вакууму. Згідно цій теорії фізичний вакуум представляє собою стан, в якому усі рівні з від'ємною енергією зайняті, а з позитивною – вільні. Між незайнятими станами з позитивною енергією і зайнятими станами з від'ємною енергією є щілина, рівна $2mc^2$. В цьому випадку якщо помістити електрон в такий вакуум, то він, в силу принципу Паулі, не зможе перейти в стан з від'ємною енергією. Єдиними можливими переходами будуть переходи між станами з позитивною енергією.

З іншої сторони, якщо електрон з від'ємною енергією $-E$ поглине фотон з енергією більше ніж $E + mc^2$, то електрон перейде в стан з позитивною енергією. Крім того, в вакуумі утворюється “дірка”, яку спостерігач сприйматиме як частинку з позитивною енергією, рівною E , позитивним зарядом e , спіном і імпульсом, які направлені в протилежну сторону, ніж у вибитого електрона. Такий стан позначають e^+ і називають позитроном. Сам процес вибивання електрона із вакууму спостерігач сприймає як процес утворення e^+e^- пари.

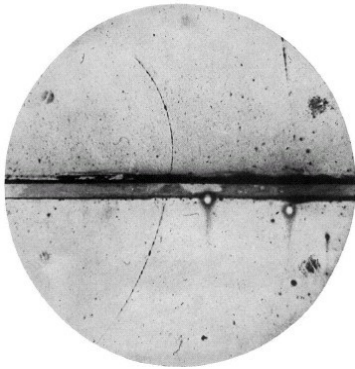


Рис. 23. Перша фотографія (зроблена К.Андерсоном) треку, який залишив позитрон в

Згодом після створення Діраком цієї теорії К.Андерсон спостерігав в камері Вільсона слід від позитивно зарядженого електрона (Рис. 23). А сам процес

утворення e^+e^- пари спостерігається, коли фотон пролітає поблизу важкого ядра.

Теорія дірок передбачає і зворотній процес. Якщо в вакуумі утворюється дірка, то електрону енергетично вигідно перейти в стан з від'ємною енергією. Вивільнена при цьому енергія виділяється у вигляді двох γ – квантів. Спостерігач сприймає цей процес як анігіляцію електрон-позитронної пари в фотони. В теперішній час цей процес також добре вивчений експериментально.

Задачі

12.1. Знайти комутатори між гамільтоніаном діраковської частинки та операторами імпульсу \hat{p} , орбітального моменту \hat{l} та його квадрата \hat{l}^2 .

12.2. Оператор спіну релятивістської діраковської частинки визначається як

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}, \quad \text{де} \quad \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}.$$

Чи комутує гамільтоніан діраковської частинки з операторами спіна \hat{s} та його квадрата \hat{s}^2 ?

12.3. Показати, що гамільтоніан діраковської частинки комутує з операторами повного моменту $\hat{j} = \hat{s} + \hat{l}$, його квадратом \hat{j}^2 та проекцією спіна на напрям \vec{n} руху частинки $\hat{\Lambda} = \vec{n} \cdot \hat{s}$ (останній оператор називається оператором *спіральності*).

Прокоментувати результати одержані в Задачах 12.1, 12.2 та 12.3.

12.4. Імпульс частинки у зовнішньому електромагнітному полі визначається як $\hat{\pi} = \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \vec{A}$, де q – заряд діраковської частинки. Показати, що для діраковської частинки виконується рівність

$$\frac{d\hat{\pi}}{dt} = q \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \hat{v} \times \vec{B} \right),$$

яка є операторним аналогом сили Лоренца.

12.5. В кварковій моделі протон розглядають як зв'язаний стан трьох кварків. При цьому вважається, що кожен із кварків утримується самоузгодженим потенціалом, який створюють інші кварки протона (модель квазінезалежних кварків). Вважаючи рух квазінезалежного кварка релятивістським та обираючи таку структуру для цього потенціалу

$$U(r) = \frac{1 + \gamma_0}{2} V(r),$$

де $V(r)$ прямує до безмежності при $r \rightarrow \infty$, розглянути рівняння для квазінезалежного кварка

$$\left[i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{1 + \gamma_0}{2c} V(r) \right] \Psi(r, t) = 0$$

та знайти енергетичний спектр для кварка. Розрахунок зробити для двох типів потенціалу, потенціалу, який лінійно росте $V(r) = V_0 + \lambda r$ та потенціалу гармонічного осцилятора $V(r) = V_0 + \lambda r^2$.

Відповіді та розв'язки задач

0.1. До зіткнення фотон та електрон мали енергії $E_\gamma = \hbar\omega$ та $E_e = M_e c^2$. При цьому, згідно з формулою (0.2), величина імпульсу фотона дорівнює $|\vec{p}| = \frac{\hbar\omega}{c}$, а імпульс електрона, за умовою, дорівнює нулю. Після розсіяння внаслідок віддачі електрон почне рухатись. Тому енергії фотона та електрона будуть (необхідно використовувати релятивістський вирази для енергії електрона)

$$E'_\gamma = \hbar\omega', \quad E'_e = \sqrt{M_e^2 c^4 + c^2 \vec{q}'^2},$$

де \vec{q}' - імпульс електрона після зіткнення з фотоном. Імпульс розсіяного фотона \vec{p}' визначається з умови збереження імпульсу

$$\vec{p} = \vec{p}' + \vec{q}',$$

причому $\vec{p}' = \hbar\vec{k}'$, де $|\vec{k}'| = \frac{\omega'}{c}$. Таким чином:

$$\vec{q}'^2 = \frac{\hbar^2}{c^2} (\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' \cos \theta),$$

де θ - кут між напрямком розповсюдження падаючого та розсіяного світла (кут розсіювання світла).

Із закону збереження енергії $E_\lambda + E_e = E'_\lambda + E'_e$ одержуємо значення частоти розсіяного світла:

$$\omega' = \omega \frac{M_e c^2}{M_e c^2 + \hbar\omega(1 - \cos \theta)}.$$

Звідси легко одержати формулу Комптона.

0.2. $v = \frac{1}{\sqrt{2}}c$. У зв'язку з тим, що швидкість електрона близька до швидкості світла потрібно в формулі де Бройля (0.3) використовувати релятивістську формулу для імпульсу електрона

$$p = \frac{m\nu}{\sqrt{1-(\nu/c)^2}}.$$

0.3. Нехай \vec{p} та \vec{p}' імпульси фотона, а \vec{q} та \vec{q}' - імпульси електрона до і після зіткнення, відповідно. Запишемо закон збереження енергії

$$\hbar\omega + \sqrt{m^2c^4 + \vec{q}^2c^2} = \hbar\omega' + \sqrt{m^2c^4 + \vec{q}'^2c^2}.$$

Підставляючи сюди $\vec{q}' = \vec{p} + \vec{q} - \vec{p}'$ одержимо рівняння, з якого витікає

$$\omega' = \omega \frac{\sqrt{m^2c^2 + q^2} + q}{\sqrt{m^2c^2 + q^2} + \frac{\hbar\omega}{c} + \left(q - \frac{\hbar\omega}{c}\right) \cos \theta}, \quad \text{де } q = |\vec{q}|.$$

Легко бачити, що частота розсіяного світла буде більшою за частоту падаючого світла, якщо $q > \hbar\omega/c$ і $\theta \neq 0$. При $\theta = 0$ дріб обертається у одиницю і $\omega' = \omega$.

1.1. Із означення оператора інверсії випливає

$$\int \psi_1^*(\vec{x}) \hat{P} \psi_2(\vec{x}) d^3x = \int \psi_1^*(\vec{x}) \psi_2(-\vec{x}) d^3x.$$

Після заміни змінних $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$ отримуємо

$$\begin{aligned} \int \psi_1^*(\vec{x}) \hat{P} \psi_2(\vec{x}) d^3x &= \int \psi_1^*(-\vec{x}) \psi_2(\vec{x}) d^3x = \\ &= \left[\int \psi_2^*(\vec{x}) \psi_1(-\vec{x}) d^3x \right]^* = \left[\int \psi_2^*(\vec{x}) \hat{P} \psi_1(\vec{x}) d^3x \right]^*. \end{aligned}$$

Власними функціями оператора інверсії будуть довільні парні та непарні функції, причому власні значення оператора інверсії $P = \pm 1$.

1.2. $e^{i\pi\hat{P}} = 1 + i\pi\hat{P} - \frac{1}{2!}\pi^2 - \frac{i}{3!}\pi^3\hat{P} + \dots = \cos \pi + i\hat{P} \sin \pi = -1$. Тут

використано властивість оператора інверсії $\hat{P}^2 = 1$.

1.3. За означенням $\exp\left(a \frac{d}{dx}\right) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} a^n \frac{d^n}{dx^n}$. Тому

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} a^n \frac{d^n \psi(x)}{dx^n}.$$

Отриманий вираз є не що інше, як ряд Тейлора для функції $\psi(x+a)$. Тобто $\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a)$.

1.4. Розглянемо оператор $e^{\xi \hat{A}} \hat{B} e^{-\xi \hat{A}}$. При $\xi=1$ він переходить у оператор, який шукаємо. Розкладемо цей оператор у ряд по степеням параметру ξ . З цією метою обчислимо похідну в точці $\xi=0$

$$\left. \frac{d e^{\xi \hat{A}} \hat{B} e^{-\xi \hat{A}}}{d\xi} \right|_{\xi=0} = e^{\xi \hat{A}} [\hat{A}, \hat{B}] e^{-\xi \hat{A}} \Big|_{\xi=0} = [\hat{A}, \hat{B}].$$

Легко також розрахувати похідну порядку n

$$\left. \frac{d^n e^{\xi \hat{A}} \hat{B} e^{-\xi \hat{A}}}{d\xi^n} \right|_{\xi=0} = [\hat{A}, [\hat{A}, \dots [\hat{A}, \hat{B}]]].$$

Таким чином

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

Покладаючи тут $\xi=1$ одержимо шукану тотожність.

1.5. $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$, інші комутаційні співвідношення можна одержати з допомогою циклічної перестановки індексів x, y, z . Оператор \hat{L}^2 комутує з \hat{L}_x, \hat{L}_y та \hat{L}_z . Фізично все це означає, що разом можуть бути виміряні лише квадрат моменту та одна з його компонент.

1.6. Оператор швидкості є повна похідна по часу від оператора координати $\hat{v} = \frac{d}{dt} \hat{x}$. Тому згідно (1.57)

$$\hat{v} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = -i \frac{\hbar}{m} \nabla = \frac{\hat{p}}{m}.$$

Тепер знайдемо оператор прискорення

$$\hat{a} = \frac{d\hat{v}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{v}] = \frac{i}{\hbar m} [\hat{H}, \hat{p}] = \frac{i}{\hbar m} [U(\bar{x}), \hat{p}].$$

Записуючи оператор імпульсу в координатному представленні одержимо

$$\hat{a} = -\frac{1}{m} \nabla U(\bar{x}) = \frac{1}{m} \vec{F}.$$

1.7. $\vec{j} = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \vec{p}.$

1.8. (i). Потрібно щоб були неперервними хвильові функції та їх перші похідні в точках a та b (умови зшивки розв'язків)

$$\begin{aligned} \psi_I(a) &= \psi_{II}(a), & \psi_{II}(b) &= \psi_{III}(b), \\ \psi'_I(a) &= \psi'_{II}(a), & \psi'_{II}(b) &= \psi'_{III}(b). \end{aligned} \quad (\text{P.1})$$

(ii). В областях I та III рівняння Шрьодінгера має вигляд

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (E - U_1) \psi(x) = 0.$$

Його загальний розв'язок є

$$\psi_{I,III}(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, \quad \text{де } \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_1 - E)}{\hbar^2}}.$$

Для того, щоб хвильову функцію можна було нормувати, потрібно вимагати виконання умов $\psi(\pm\infty) = 0$. Звідси випливає

$$\psi_I(x) = Ae^{\kappa x}, \quad \psi_{III}(x) = Be^{-\kappa x}. \quad (\text{P.2})$$

В області II розв'язок рівняння Шрьодінгера

$$\psi_{II}(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, \quad \text{де } k = \sqrt{\frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2}},$$

можна переписати у вигляді

$$\psi_{II}(x) = C \sin(kx + \varphi). \quad (\text{P.3})$$

Таким чином маємо чотири константи A, B, C та φ . На них потрібно накласти чотири умови (P.1) та умову нормування. Тобто, отримаємо умов більше, ніж констант. Тому розв'язок буде існувати тільки при певних значеннях енергії E .

Для того, щоб знайти енергетичний спектр досить розглянути умови

$$\frac{\psi'_I(a)}{\psi_I(a)} = \frac{\psi'_{II}(a)}{\psi_{II}(a)} \quad \text{та} \quad \frac{\psi'_{II}(b)}{\psi_{II}(b)} = \frac{\psi'_{III}(b)}{\psi_{III}(b)}.$$

Звідси одержуємо систему двох рівнянь для двох величин E та φ

$$\begin{aligned} \kappa &= k \operatorname{ctg}(ka + \varphi), \\ -\kappa &= k \operatorname{ctg}(kb + \varphi). \end{aligned}$$

У загальному випадку ця система може бути розв'язана лише чисельними методами.

1.9. В цьому випадку $\kappa = \infty$ і хвильові функції у областях I та III [див. (P.2)] дорівнюють нулю, $\psi_I(x) = \psi_{III}(x) = 0$. Тому в області II на хвильову функцію (P.3) потрібно наложити умову

$$\psi_{II}(0) = \psi_{II}(a) = 0.$$

Звідси одержимо $\varphi = 0$ та $k = \frac{n\pi}{a}$, або

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar n \pi}{a} \right)^2, \quad \text{де} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{P.4})$$

Відповідно нормована хвильова функція є

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), & \text{при} \quad 0 < x < a, \\ 0, & \text{при} \quad x < 0, \text{ та } x > a. \end{cases} \quad (\text{P.5})$$

1.10. В окремих областях розв'язки рівняння Шрьодінгера мають вигляд

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_1 e^{ik_0 x} + B_1 e^{-ik_0 x}, & k_0 &= \sqrt{2mE / \hbar^2}, \\ \psi_{II} &= A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, & k &= \sqrt{2m(E + U_0) / \hbar^2}, \\ \psi_{III} &= A_3 e^{ik_0 x} + B_3 e^{-ik_0 x}. \end{aligned}$$

Так як за умовою задачі потік падає на потенціал зліва, то в область III пройде лише падаюча хвиля, а відбита хвиля попаде в область I. Тому потрібно покласти $B_3 = 0$. Таким чином маємо п'ять умов

(чотири умови зшивки розв'язків (Р.1) та умова нормування) на п'ять коефіцієнтів. Це означає, що розв'язок існує при довільних значеннях енергії $E > 0$.

(i). По своєму фізичному змісту коефіцієнт проходження

$$D = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2,$$

а коефіцієнт відбивання

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2.$$

Причому $D + R = 1$.

З умови зшивки у точці $-b$ витікає

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{k + k_0}{2k_0} A_2 e^{i(k_0 - k)b} + \frac{k_0 - k}{2k_0} B_2 e^{i(k_0 + k)b}, \\ B_1 &= \frac{k_0 - k}{2k_0} A_2 e^{-i(k_0 + k)b} + \frac{k + k_0}{2k_0} B_2 e^{i(k - k_0)b}, \end{aligned} \quad (\text{Р.6})$$

а з умови зшивки у точці b

$$A_2 = \frac{k + k_0}{2k} A_3 e^{i(k_0 - k)b}, \quad B_2 = \frac{k - k_0}{2k} A_3 e^{i(k_0 + k)b}. \quad (\text{Р.6a})$$

Підставляючи ці вирази у вирази (Р.6) отримуємо

$$D = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right)^2 \sin^2(2bk) \right]^{-1}.$$

(ii). У випадку, коли $2kb = n\pi$, коефіцієнт проходження $D = 1$.

1.11. Ця задача розв'язується так само, як і Задача 1.10 за виключенням того, що хвильове число k стає уявним

$$k = i \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \equiv i\kappa.$$

Тоді можна скористатись виразами (Р.6) та (Р.6a) з попередньої задачі, в яких $k \rightarrow i\kappa$. В результаті отримаємо

$$D = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{\kappa} - \frac{\kappa}{k_0} \right)^2 \operatorname{sh}^2(2b\kappa) \right]^{-1}.$$

У випадку коли $\kappa b \gg 1$ цей вираз переходить у

$$D \approx 4 \left(\frac{\kappa k_0}{\kappa^2 + k_0^2} \right)^2 \exp \left[-\frac{4b}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right].$$

1.12. $N = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}}$. Середньоквадратичний розмір визначається як

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx = \frac{a^2}{2}.$$

1.13. Маємо рівняння Шрьодінгера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \kappa x^2 \right) \psi(x) = E \psi(x).$$

Зручно перейти до безрозмірних змінних з допомогою заміни $\rho = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} x$, $\varphi(\rho) = \psi \left(\sqrt{\hbar / (m\omega)} \rho \right)$ та $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$, де

$\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}$ в класичному наближенні має зміст частоти коливання

частинки у гармонічному потенціалі. Тоді рівняння Шрьодінгера перетвориться на

$$\left(-\frac{d^2}{d\rho^2} + \rho^2 \right) \varphi(\rho) = \varepsilon \varphi(\rho). \quad (\text{P.7})$$

При $\rho^2 \rightarrow \infty$ праву частину можна замінити на нуль. Тоді видно, що спадаючий на безмежності розв'язок має асимптотичну поведінку

$$\varphi(\rho) \propto e^{-\frac{1}{2}\rho^2}.$$

Тому точний розв'язок (P.7) будемо шукати у вигляді

$$\varphi(\rho) = \sum_{k=0}^n a_k \rho^k e^{-\frac{1}{2}\rho^2}.$$

Для того, щоб розв'язок приводив до функцій, які спадають на безмежності, потрібно вимагати, щоб ряд обривався при деякому значенні $k = n$. Тобто

$$\varphi(\rho) = H_n(\rho) e^{-\frac{1}{2}\rho^2}, \quad (\text{P.8})$$

де $H_n(\rho) = \sum_{k=0}^n a_k \rho^k$ поліном степені n . Підставляючи цей вираз у рівняння (P.7) одержимо

$$-\sum_{k=2}^n a_k k(k-1)\rho^{k-2} + \sum_{k=0}^n a_k (2k+1-\varepsilon)\rho^k = 0.$$

Роблячи в першій сумі заміну $k-2 \rightarrow k$ отримаємо рівняння

$$\sum_{k=0}^{n-2} [a_k (2k+1-\varepsilon) - a_{k+2} (k+1)(k+2)] \rho^k + a_{n-1} (2n-1-\varepsilon)\rho^{n-1} + a_n (2n+1-\varepsilon)\rho^n = 0.$$

Для того, щоб ця рівність мала місце при довільному ρ , потрібно вимагати, щоб дорівнювали нулю члени при однакових степенях ρ . Таким чином отримаємо систему алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} a_n (2n+1-\varepsilon) = 0, \\ a_{n-1} (2n-1-\varepsilon) = 0, \\ a_k (2k+1-\varepsilon) = a_{k+2} (k+1)(k+2), \text{ при } k \leq n-2. \end{cases}$$

З першого рівняння отримаємо спектр $\varepsilon = 2n+1$ або

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{P.9})$$

З другого рівняння випливає, що $a_{n-1} = 0$, а з останнього – рекурентні співвідношення. Зауважимо, що з умови $a_{n-1} = 0$ разом з рекурентним співвідношенням випливає, що в залежності від

парності чи непарності числа n поліном $H_n(\rho)$ містить лише парні або непарні степені ρ . Тому зручно в (Р.8) замість k ввести новий індекс сумування $m = \frac{1}{2}(n-k)$. При цьому з допомогою індукції з рекурентних співвідношень легко одержати такий вираз для коефіцієнтів

$$a_{n-2m} = \frac{(-1)^m}{2^{2m} m!(n-2m)!} a_{0,1},$$

де a_0 береться для парних n , а a_1 - для непарних n . По традиції покладають цей коефіцієнт рівним $2^n n!$. Остаточню

$$H_n(\rho) = n! \sum_{m=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^m (2\rho)^{n-2m}}{m!(n-2m)!}. \quad (\text{Р.10})$$

Тут $[n/2] = n/2$ або $(n-1)/2$ для парного чи непарного n . Поліноми $H_n(\rho)$ називають поліномами Ерміта. Хвильові функції,

які нормовані умовою $\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{n'}(x) \psi_n(x) = \delta_{n'n}$, є

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{\pi} 2^n n! \omega m}} H_n(\rho) e^{-\frac{1}{2}\rho^2}. \quad (\text{Р.11})$$

2.1. Запишемо умову квантування Бора-Зоммерфельда

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a \sqrt{2m \left(E - \frac{1}{2} \kappa y^2 \right)} dy = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi,$$

де $-a$ та a - точки повороту, причому $a = \sqrt{2E/\kappa}$. Після інтегрування одержуємо $E = \hbar\omega(n+1/2)$, що співпадає з точним результатом (задача 1.13).

2.2. Хвильова функція є

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & \text{при } x < 0, \\ \frac{A}{\sqrt{q(x)}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_0^x q(y) dy + \varphi_0 \right\}, & \text{при } x_0 < x < a_1, \\ \frac{C_1}{\sqrt[4]{2m[V(x) - E]}} \times \\ \quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^x \sqrt{2m[V(y) - E]} dy \right\}, & \text{при } x > a_1, \end{cases}$$

де $q(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]} / \hbar^2$. Важливо, що коли $x \rightarrow 0$, то імпульс $p(x) = \pm \hbar q(x)$ не прямує до нуля. Тому умови квазікласичного наближення виконуються при $x \rightarrow 0$. Таким чином для того, щоб зшити розв'язки у точці $x = 0$ потрібно покласти $\varphi_0 = 0$. В точці a_1 зшивка проходить звичайним чином і $\varphi_1 = \frac{\pi}{4}$. В результаті умова (2.32) перетвориться на

$$\frac{1}{2\hbar} \int_0^a q(y) dy = \pi \left(n + \frac{3}{4} \right).$$

2.3. Використовуючи результат попередньої задачі пишемо

$$\int_0^a \sqrt{2m(E_n - \lambda x)} dx = \hbar \pi \left(n + \frac{3}{4} \right),$$

де $n = 0, 1, 2, \dots$, а відстань $a = E_n / \lambda$. Обчислюючи інтеграл одержимо

$$E_n^{\text{ВКБ}} = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{9\pi^2 \hbar^2 \lambda^2}{m} \left(n + \frac{3}{4} \right)^2} \equiv \varepsilon_n^{\text{ВКБ}} \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m}}.$$

Тепер розв'яжемо задачу точно. Запишемо рівняння Шрьодінгера в області $x > 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \lambda x \psi(x) = E \psi(x).$$

Зробимо заміну

$$\rho = \beta(\lambda x - E), \quad \text{де} \quad \beta = \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 \lambda^2}}.$$

При цьому рівняння перетвориться в рівняння

$$\psi''(\rho) = \rho \psi(\rho).$$

Його розв'язок, який прямує до нуля при $\rho \rightarrow \infty$, є функція Ейрі першого роду (див. Додаток А)

$$\psi(\rho) = N \text{Ai}(\rho).$$

Далі потрібно задовольнити умові неперервності у точці $x = 0$

$$\psi(\rho)|_{x=0} = 0.$$

Це дає умову квантування енергії

$$E_{n-1} = -\frac{a_n}{\beta} \equiv \varepsilon_n \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m}},$$

де $n = 1, 2, 3, \dots$, а a_n - значення аргументу при якому функція Ейрі дорівнює нулю.

Порівняємо результати точного розрахунку з розрахунком у ВКБ наближені:

n	ε_n	$\varepsilon_n^{\text{ВКБ}}$	$\Delta E_n / E_n (\%)$
1	2,3381	2,3203	8
2	4,0879	4,0818	0,15
3	5,5205	5,5172	0,08

Бачимо, що точність ВКБ-методу зростає при збільшенні n .

2.4. Ймовірність α - розпаду W визначається двома факторами: (і) коефіцієнтом тунелювання крізь бар'єр D та (іі) кількістю ударів ξ α - частинки о поверхню ядра

$$W = \xi D.$$

(і) Коефіцієнт тунелювання знаходимо з формули (2.55) підставивши туди $U(r) = 2e^2(Z-2)/r$ і поклавши $x_0 = R_{\text{яд}}$ та $x_1 = r_0 = 2e^2(Z-2)/E$, де E - енергія α - частинки і Z -

порядковий номер ядра, яке розпадається. Інтеграл береться з допомогою заміни $\cos^2 \varphi = r / r_0$

$$\int_{R_{\text{яд}}}^{r_0} \sqrt{\frac{2e^2 Z}{r} - E} dr = 2r_0 \sqrt{E} \int_0^{\varphi_0} \sin^2 \varphi d\varphi = r_0 \sqrt{E} (\varphi_0 - \sin \varphi_0 \cos \varphi_0),$$

де $\varphi_0 = \arccos \sqrt{R_{\text{яд}} / r_0} \approx \pi / 2 - \sqrt{R_{\text{яд}} / r_0}$ (покладаємо, що $r_0 \square R_{\text{яд}}$). В результаті отримаємо

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{4}{\hbar} \left[\frac{\pi e^2 (Z-2)}{\nu} - 2e \sqrt{R_{\text{яд}} m (Z-2)} \right] \right\},$$

де $\nu = \sqrt{2E / m}$ - швидкість α - частинки.

(ii) Для оцінки можна покласти, що частота ξ є відношення швидкості α - частинки до діаметра ядра, $\xi = \nu / 2R_{\text{яд}}$. Тому остаточно

$$W \approx \frac{\nu}{2R_{\text{яд}}} \exp \left\{ -\frac{4}{\hbar} \left[\frac{\pi e^2 (Z-2)}{\nu} - 2e \sqrt{R_{\text{яд}} m (Z-2)} \right] \right\}.$$

3.1. Проінтегруємо ліву частину разом з довільною функцією $f(x)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d\delta(x)}{dx} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} d[x\delta(x)f(x)] - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \frac{d}{dx} [xf(x)] dx.$$

Очевидно, перший інтеграл дає нуль, а другий інтеграл зведеться до:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d\delta(x)}{dx} f(x) dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \left[f(x) + x \frac{df(x)}{dx} \right] dx.$$

Виконуючи інтегрування з допомогою δ -функції одержимо:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d\delta(x)}{dx} f(x) dx = -f(0).$$

Цей самий вираз одержимо безпосередньо інтегруючи праву частину рівності з функцією $f(x)$.

3.2. Виконаємо Фур'є-перетворення

$$\begin{aligned}\phi(p) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar} px} \psi(x) = \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\pi a \sqrt{\pi\hbar}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\hbar k - p)x - \frac{1}{2a^2}x^2\right] = \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\pi a \sqrt{\pi\hbar}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{1}{2a^2} \left\{ \left[x + \frac{a^2 i}{\hbar} (p - \hbar k) \right]^2 + \frac{a^4}{\hbar^2} (p - \hbar k)^2 \right\}\right).\end{aligned}$$

Інтегруючи після заміни змінних $x' = x + i \frac{a^2}{\hbar} (p - \hbar k)$ отримаємо

$$\phi(p) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi\hbar}}} \exp\left[-\frac{a^2}{2\hbar^2} (p - \hbar k)^2\right].$$

3.3. У координатному представленні дія операторі інверсії визначається як $\hat{P}\psi(\vec{x}) = \psi(-\vec{x})$. Зробимо Фур'є перетворення у правій та лівій частинах цього виразу.

У лівій частині маємо $\int d^3 p' \langle \vec{p} | \hat{P} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \psi \rangle = \hat{P}_p \phi(\vec{p})$. Це є не що інше, як визначення оператора інверсії у імпульсному представленні.

У правій частині отримуємо

$$\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \int d^3 x e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \psi(-\vec{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \int d^3 x e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \psi(\vec{x}) = \phi(-\vec{p}).$$

Таким чином оператор інверсії у імпульсному представленні просто змінює знак імпульсу.

3.4. Оскільки імпульс вільної частинки комутує з гамільтоніаном, то представлення Гайзенберга і Шрьодінгера для нього

співпадають: $\hat{p}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{p}_{III} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{p}_{III} \equiv \hat{p}$. Для оператора

координати скористаємось результатом Задачі 1.4, де покладемо

$$\hat{A} = \frac{i}{\hbar} \hat{H}t = \frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} t, \text{ а } \hat{B} = \hat{x}_{\text{III}}. \text{ Тоді}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \frac{i}{\hbar} t [\hat{H}, \hat{x}_{\text{III}}] = \frac{\hat{p}}{m} t, \text{ а } [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] \square [\hat{H}, \hat{p}] = 0.$$

Таким чином

$$\hat{x}_{\text{I}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{x}_{\text{III}} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} = \hat{x}_{\text{III}} + \frac{\hat{p}}{m} t.$$

Знайдені вирази для $\hat{x}(t)$ та $\hat{p}(t)$ легко співставити з відповідними класичними аналогами.

4.1. Використовуючи явний вираз для оператора спіна запишемо рівняння на власні значення для оператора \hat{s}_x

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}.$$

Розглядаючи це матричне рівняння як систему двох алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} -s_x \chi_1 + \frac{\hbar}{2} \chi_2 = 0, \\ \frac{\hbar}{2} \chi_1 - s_x \chi_2 = 0, \end{cases}$$

запишемо умову їх сумісності

$$\det \begin{pmatrix} -s_x & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -s_x \end{pmatrix} = s_x^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0,$$

Звідки випливає $s_x = \pm \frac{\hbar}{2}$. Тоді з першого рівняння системи

одержимо $\chi_2 = \pm \chi_1$. Нормуючи хвильові функції отримаємо

$$\chi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Для оператора \hat{s}_y отримуємо ті самі власні значення, які відповідають власним функціям

$$\chi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}.$$

4.2. За означенням $\hat{F} = e^{i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\vec{a}\cdot\vec{\sigma})^n$. З властивостей матриць Паулі (4.39) одержимо $(\vec{a}\cdot\vec{\sigma})^2 = a^2$. Тоді

$$(i\vec{a}\cdot\vec{\sigma})^n = \begin{cases} i(-1)^{(n-1)/2} a^{n-1} \vec{a}\cdot\vec{\sigma} & \text{при } n \text{ непарному,} \\ (-1)^{n/2} a^n & \text{при } n \text{ парному.} \end{cases}$$

В результаті $\hat{F} = \cos a + i\vec{n}\cdot\vec{\sigma} \sin a$, де $\vec{n} = \vec{a}/|\vec{a}|$.

4.3. З умови $\chi^\dagger \chi = 1$ знайдемо коефіцієнт нормування $N = 1/\sqrt{3}$. Тоді використовуючи явний вигляд оператора спіна електрона одержимо $\chi^\dagger \hat{s}_x \chi = \frac{\sqrt{2}}{3} \hbar$, $\chi^\dagger \hat{s}_y \chi = 0$ та $\chi^\dagger \hat{s}_z \chi = -\frac{1}{6} \hbar$.

5.1. Підставляючи (5.33) в рівняння (5.18) з урахуванням співвідношення (5.30) одержимо

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2M_e} \sum_{\nu=1}^{n_r} \beta_{\nu} [l(l+1) - (l+\nu+1)(l+\nu)] r^{\nu-2} + \\ & + \sum_{\nu=0}^{n_r} \beta_{\nu} \left[\frac{\hbar^2}{M_e} \alpha(l+\nu+1) - e \right] r^{\nu-1} = 0. \end{aligned}$$

Роблячи заміну $\nu \rightarrow \nu+1$ в першій сумі отримаємо

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu=0}^{n_r-1} r^{\nu-1} \left\{ \beta_{\nu+1} \frac{\hbar^2}{2M_e} [l(l+1) - (l+\nu+2)(l+\nu+1)] + \right. \\ & \left. + \beta_{\nu} \left[\frac{\hbar^2}{M_e} \alpha(l+\nu+1) - e \right] \right\} + r^{n_r} \beta_{n_r} \left[\frac{\hbar^2}{M_e} \alpha(l+n_r+1) - e \right] = 0. \end{aligned}$$

Прирівнюючи до нуля члени при однакових степенях r отримаємо рекурентне співвідношення та умову на енергетичний спектр.

5.2. У зв'язку з тим, що потенціал сферично-симетричний, то гамільтоніан комутує з орбітальним моментом і тому відповідні стани мають певні значення орбітального та магнітного квантових чисел, тому хвильову функцію шукаємо у вигляді

$$\psi_{lm}(\vec{r}) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \frac{1}{r} R_l(r).$$

При цьому рівняння для радіальної хвильової функції буде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M_e r^2} - \frac{e^2 d}{r^2} - \frac{e^2}{r} \right] R_l(r) = ER_l(r).$$

Другий та третій доданки к квадратній дужці мають однакову залежність від r і тому їх можна об'єднати у

$$\frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2M_e r^2}, \quad \text{де } \tilde{l}(\tilde{l}+1) = l(l+1) - \frac{2M_e e^2 d}{\hbar^2},$$

або

$$\tilde{l} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(2l+1)^2 - \frac{8M_e e^2 d}{\hbar^2}} \approx l - \frac{d}{\left(l + \frac{1}{2}\right) a_0} \equiv l - \sigma.$$

Для знаходження енергетичних рівнів можна скористатись формулою для енергії атому водню замінивши в ньому $n \rightarrow n^* = n_r + \tilde{l} + 1 = n - \sigma$. Тоді

$$E_{n^*} = -\frac{M_e e^4}{2(n - \sigma)^2 \hbar^2}.$$

Відмітимо, що σ залежить від орбітального моменту, і тому виникає розщеплення енергетичних рівнів по l при одному значенні головного квантового числа. Це є результат відхилення потенціалу від кулонівського.

Для того, щоб знайти хвильові функції, потрібно врахувати поведінку хвильової функції $R_l \propto r^{\tilde{l}+1}$ при $r \rightarrow 0$. Тому розв'язки рівняння будемо шукати у вигляді

$$R_l(r) = r^{l-\sigma+1} e^{-\alpha r} \sum_{\nu=0}^{n_r} \beta_{\nu} r^{\nu}.$$

де α визначається формулою (5.30). Далі задача розв'язується так само, як для атому водню.

5.3. Запишемо стаціонарне рівняння Шрьодінгера у декартових координатах

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{\kappa}{2} (x^2 + y^2 + z^2) \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Розділяючи змінні отримаємо три незалежних одномірних осцилятора, які мають енергії $E_x = \hbar \omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right)$,

$$E_y = \hbar \omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \quad \text{і} \quad E_z = \hbar \omega \left(n_z + \frac{1}{2} \right), \quad \text{де} \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$

Таким чином

$$E_{n_x n_y n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \hbar \omega \left(n + 3/2 \right), \quad \text{де} \quad n = n_x + n_y + n_z,$$

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A H_{n_x}(\rho_x) H_{n_y}(\rho_y) H_{n_z}(\rho_z) e^{-\frac{1}{2}(\rho_x^2 + \rho_y^2 + \rho_z^2)},$$

$$\text{де} \quad A = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{\pi \omega M}} \right)^{3/2} \left(2^n n_x! n_y! n_z! \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad \rho_x = \sqrt{\frac{\omega M}{\hbar}} x \quad \text{і т.д.}$$

У зв'язку з тим, що поліном Ерміта складається або з парних, або з непарних степенів аргументу він є, в залежності від n , парною або непарною функцією. Таким чином парність стану визначається за формулою $P = (-1)^{n_x + n_y + n_z} = (-1)^n$. Тому у вироджений рівень входять стани з парними або непарними значеннями орбітального моменту в залежності від головного квантового числа n . У атомі водню у вироджений рівень входять стани з різною парністю і відповідно входять парні та непарні моменти.

При фіксованих n та n_x числа n_y і n_z приймають $n - n_x + 1$ значення. Тому кратність виродження дорівнює

$$g = \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = \frac{(n+2)(n+1)}{2}.$$

5.4. Потенціал в точці \vec{r} визначається через густину заряду

$$\varphi(\vec{r}) = \int \frac{\rho(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r'. \quad (\text{P.12})$$

В свою чергу густина заряду визначається як сума густин заряду для ядра та електрону

$$\rho(\vec{r}) = e \left[\delta(\vec{r}) - |\psi_{1s}(\vec{r})|^2 \right],$$

де $\psi_{1s}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$ (див. (5.7), (5.17) та (5.41)) – хвильова

функція для основного стану атома водню. Вважається, що ядро представляє точковий заряд.

Будемо працювати в системі координат, де вісь z направлена вздовж вектора \vec{r} . Скориставшись формулою (Д.12) інтеграл (P.12) легко взяти

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}) &= e \left[\frac{1}{r} - \int \frac{|\psi_{1s}(r')|^2 d^3 r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] = \\ &= e \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \int d\Omega \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \left(\frac{r'}{r} \right)^l |\psi_{1s}(\vec{r}')|^2 - \right. \\ &\quad \left. - \int_r^{\infty} dr' r' \int d\Omega \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \left(\frac{r}{r'} \right)^l |\psi_{1s}(\vec{r}')|^2 \right] = \\ &= e \left[\frac{1}{r} - \frac{4}{a_0^3 r} \int_0^r dr' r'^2 e^{-2r'/a_0} - \frac{4}{a_0^3} \int_r^{\infty} dr' r' e^{-2r'/a_0} \right] = e \frac{e^{-2r/a_0}}{a_0 r} (a_0 + r). \end{aligned}$$

Це є так званий *екраниваний кулоновський потенціал*. При $r \ll a_0$

він переходить у чисто кулоновський потенціал ядра $\varphi(\vec{r}) = \frac{e}{r}$.

6.1. $E_n^{(1)} = \frac{1}{2} V_0.$

6.2. Згідно з результатами Задачі 1.13 (див. (P.11)) потрібні хвильові функції є

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{\omega m}{\pi \hbar}} e^{-\frac{\omega m}{2\hbar} x^2}, \quad \text{та} \quad \psi_1(x) = \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}} x e^{-\frac{\omega m}{2\hbar} x^2}.$$

Тоді $E_0^{(1)} = V_0 a \sqrt{\frac{\omega m}{\omega m a^2 + \hbar}}, \quad E_1^{(1)} = V_0 a^3 \left(\frac{\omega m}{\omega m a^2 + \hbar}\right)^{3/2}.$

6.3. Діагональний матричний елемент від першого доданку у збуренні очевидно дорівнює нулю,

$$\langle n | \alpha x^3 | n \rangle \square \int_{-\infty}^{\infty} d\rho \rho H_n^2(\rho) e^{-\frac{1}{2}\rho^2} = 0, \quad \text{де} \quad \rho = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} x.$$

Для того, щоб розрахувати діагональний матричний елемент від другого доданку використаємо (3.50), тоді

$$\langle n | x^4 | n \rangle = \sum_{n', n'', n'''} \langle n | x | n' \rangle \langle n' | x | n'' \rangle \langle n'' | x | n''' \rangle \langle n''' | x | n \rangle.$$

Для того, щоб розрахувати матричний елемент $\langle n | x | n' \rangle$ скористуємось властивістю поліномів Ерміта

$$z H_n(z) = n H_{n-1}(z) + \frac{1}{2} H_{n+1}(z).$$

Використовуючи ортонормовані хвильові функції (P.11), отримаємо

$$\langle n | x | n' \rangle = \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}} \delta_{n-1, n'} + \sqrt{\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}} \delta_{n+1, n'}. \quad (\text{P.13})$$

Тоді

$$E_n^{(1)} = \beta \langle n | x^4 | n \rangle = 3\beta \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (2n^2 + 2n + 1).$$

6.4. Збурення не залежить від кутових змінних і тому не зміщує стани для різних орбітальних моментів. Тому можна не звертати увагу на виродження по орбітальному моменту і користуватись теорією збурень для не виродженого спектру.

Використовуючи хвильові функції (5.41) одержимо

$$E_{2s}^{(1)} = -\frac{e^2 d}{2a_0^2} \int_0^\infty d\rho \left(1 - \frac{1}{2}\rho\right)^2 e^{-\rho} = -\frac{e^2 d}{4a_0^2},$$

$$E_{2p}^{(1)} = -\frac{e^2 d}{24a_0^2} \int_0^\infty d\rho \rho^2 e^{-\rho} = -\frac{e^2 d}{12a_0^2}.$$

Тепер порівняємо з результатами точного розрахунку. Відмітимо, що перший порядок теорії збурень відповідає членові лінійному по $d/a_0 \ll 1$. Тому розкладемо вираз для енергії по цьому параметру

$$E_{nl}^{(1)} = -\frac{e^2 d}{n^3 a_0^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)}.$$

Легко бачити, що ця формула дає ті самі результати, які було одержано за теорією збурень.

6.5. За умовою задачі незбурені хвильові функції є

$$\psi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Тоді

$$E_1^{(1)} = \psi_1^\dagger H_1 \psi_1 = V_{11}, \quad E_2^{(1)} = \psi_2^\dagger H_1 \psi_2 = V_{22},$$

$$\psi_1^{(1)} = \frac{V_{12}^*}{E_1 - E_2} \psi_2^{(0)}, \quad \psi_2^{(1)} = \frac{V_{12}}{E_2 - E_1} \psi_1^{(0)}.$$

6.6. Виходячи з умову нормування

$$\int d^3x |\psi(r)|^2 = 4\pi N^2 \int_0^\infty dr r^2 (1 + ar)^2 e^{-2ar} = \frac{7\pi N^2}{a^3} = 1$$

знайдемо $N = \sqrt{\frac{a^3}{7\pi}}$.

Для того, щоб знайти середнє значення кінетичної енергії запишемо її оператор \hat{T} у сферичних координатах (див. формулу (5.2)-(5.4)). У зв'язку з тим, що пробна функція відповідає s -стану, у кінетичну енергію дає внесок лише радіальний рух. Тому (див. (5.17)-(5.18))

$$\hat{T}\psi(r) = -\frac{N}{r} \frac{\hbar^2}{2m} \left[r(1+ar)e^{-ar} \right]'' = \frac{\hbar^2 Na^2}{2m} (3-ar)e^{-ar}$$

і середнє значення кінетичної енергії буде

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle &= 4\pi \frac{\hbar^2 N^2}{2m} a^2 \int_0^\infty dr r^2 (1+ar)(3-ar)e^{-2ar} = \\ &= \frac{3\hbar^2 a^2}{14m}. \end{aligned}$$

Тепер знайдемо середню потенційну енергію

$$\langle V \rangle = 2\pi N^2 \kappa \int_0^\infty dr r^4 (1+ar)^2 e^{-2ar} = \frac{81}{28} \frac{\kappa}{a^2}.$$

Таким чином маємо

$$E(a) = \frac{3}{14} \frac{\hbar^2 a^2}{m} + \frac{81}{28} \frac{\kappa}{a^2}.$$

Мінімум енергії $E(a)$ досягається при значенні параметру

$$a_{\text{мін}}^2 = 3\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{m\omega}{\hbar} \text{ і дорівнює } E(a_{\text{мін}}) = \frac{9}{7}\sqrt{\frac{3}{2}}\hbar\omega. \text{ Це лише на 5\%}$$

більше за точне значення енергії основного стану тривимірного гармонічного осцилятора $E_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

6.7. Спочатку визначимо коефіцієнт нормування $N = \sqrt[4]{a/\pi}$. Далі розрахуємо середнє значення енергії

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2 a}{4m} + \frac{3\lambda}{4a^2}.$$

Мінімум енергії відповідає значенню параметру a , яке одержуємо

з рівняння $\frac{d}{da} \left(\frac{\hbar^2 a}{m} + \frac{3\lambda}{a^2} \right) = 0$. Отже $a = \sqrt[3]{\frac{6\lambda m}{\hbar^2}}$. Використовуючи

це значення параметру у виразі для середньої енергії одержимо

$$E_{\text{осн.}} = \frac{3}{4} \sqrt[3]{\frac{3\hbar^4 \lambda}{4m^2}}.$$

7.1. Помножимо рівняння Паулі (7.12) зліва на $\Psi^\dagger(\vec{x}, t)$. В результаті отримаємо

$$\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial |\Psi(\vec{x}, t)|^2}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \Psi^\dagger(\vec{x}, t) \left(-\hbar^2 \Delta + \frac{\hbar e}{ic} \vec{A} \cdot \nabla \right) \Psi(\vec{x}, t) + \right. \\ \left. + \left[\frac{1}{2M} \left(\frac{\hbar e}{ic} \operatorname{div} \vec{A} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right) + U(\vec{r}) \right] |\Psi(\vec{x}, t)|^2 + \Psi^\dagger(\vec{x}, t) \mu_B \hat{\sigma} \cdot \vec{B} \Psi(\vec{x}, t) \right].$$

Тепер візьмемо рівняння ермітово-спряжене до рівняння Паулі і помножимо його на $\Psi(\vec{x}, t)$ зправа [при цьому врахуємо, що $[\vec{\sigma} \Psi(\vec{x}, t)]^\dagger = \Psi^\dagger(\vec{x}, t) \vec{\sigma}$]

$$-\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial |\Psi(\vec{x}, t)|^2}{\partial t} = \frac{1}{2M} \left[\left(-\hbar^2 \Delta + \frac{\hbar e}{ic} \vec{A} \cdot \nabla \right) \Psi^\dagger(\vec{x}, t) \right] \Psi(\vec{x}, t) + \\ + \left[\frac{1}{2M} \left(-\frac{\hbar e}{ic} \operatorname{div} \vec{A} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right) + U(\vec{r}) \right] |\Psi(\vec{x}, t)|^2 + \Psi^\dagger(\vec{x}, t) \mu_B \hat{\sigma} \cdot \vec{B} \Psi(\vec{x}, t).$$

Віднімаючи від одного рівняння друге після простих перетворень маємо

$$\frac{\partial |\Psi(\vec{x}, t)|^2}{\partial t} = -\operatorname{div} \left\{ \frac{\hbar}{2iM} \left[\Psi^\dagger(\vec{x}, t) \nabla \Psi(\vec{x}, t) - \nabla \Psi^\dagger(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t) \right] - \right. \\ \left. - \frac{\hbar}{2Mc} \vec{A} |\Psi(\vec{x}, t)|^2 \right\}.$$

Ототожнюючи $\rho(\vec{x}, t) = |\Psi(\vec{x}, t)|^2$ з густиною ймовірності, а

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2iM} \left[\Psi^\dagger(\vec{x}, t) \nabla \Psi(\vec{x}, t) - \nabla \Psi^\dagger(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t) \right] - \frac{\hbar}{2Mc} \vec{A} |\Psi(\vec{x}, t)|^2$$

з струмом густини ймовірності приходимо до рівняння неперервності

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0.$$

7.2. Оператор прискорення визначається як

$$\hat{a} = \frac{d\hat{v}}{dt} = \frac{\partial \hat{v}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{v} \right],$$

де оператор швидкості згідно (7.19) є

$$\hat{v} = \frac{1}{M} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right).$$

Тоді, приймаючи до уваги, що оператор імпульсу не залежить від часу явно, одержимо

$$\hat{a} = \frac{e}{Mc} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{v}] = \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \frac{iM}{2\hbar} [\hat{v}^2, \hat{v}] \hat{v} - \frac{ie}{\hbar M} [\varphi, \hat{p}].$$

Тепер скористуємось комутатором для операторів швидкості (7.22) і одержимо

$$\frac{iM}{2\hbar} [\hat{v}^2, \hat{v}] = \frac{-e}{2Mc} (\hat{v} \times \vec{B} - \vec{B} \times \hat{v}).$$

Таким чином оператор прискорення зарядженої частинки у зовнішньому електромагнітному полі є

$$\hat{a} = \frac{-e}{M} \vec{E} - \frac{e}{2Mc} (\hat{v} \times \vec{B} - \vec{B} \times \hat{v}),$$

де $\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ - напруженість електричного поля.

Якщо помножити праву та ліву частини на масу частинки, то одержимо силу Лоренца.

7.3. У представленні Шрьодінгера похідна по часу визначається згідно (1.56). Тому

$$\frac{d\hat{s}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{s}_i] = \frac{i}{2} [\hat{H}, \sigma_i] = \frac{i\mu_B}{2} [\vec{B} \cdot \vec{\sigma}, \sigma_i].$$

Використовуючи властивість матриць Паулі (4.37) приходимо до

$$\frac{d\hat{s}_i}{dt} = \frac{i\mu_B}{2} \sum_{k=1}^3 B_k [\sigma_k, \sigma_i] = \mu_B (\vec{B} \times \vec{\sigma})_i.$$

7.4. В зв'язку з тим, що заряд у нейтрона відсутній, то гамільтоніан для нейтрона у зовнішньому магнітному полі є

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M_n} \Delta - \mu_n \vec{B} \cdot \vec{\sigma}, \text{ а оператор швидкості } \hat{v} = \frac{\hbar}{iM_n} \nabla, \text{ де } M_n$$

- маса нейтрона. Тоді

$$\hat{a} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{v}] = -\frac{\mu_n}{M_n} \sum_{i=1}^3 [B_i, \nabla] \sigma_i = -\frac{\mu_n}{M_n} \nabla (\vec{B} \cdot \vec{\sigma}).$$

7.5. Запишемо хвильову функцію у вигляді (7.11). Тоді рівняння Шрьодінгера перетвориться на систему зв'язаних рівнянь

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = -\mu_n B' \Psi_1 - \mu_n B e^{-i\omega t} \Psi_2, \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = -\mu_n B' \Psi_2 - \mu_n B e^{-i\omega t} \Psi_1. \end{cases}$$

З допомогою заміни

$$\Psi_1 = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \phi_1, \quad \Psi_2 = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \phi_2$$

система звидиться до

$$\begin{cases} i\dot{\phi}_1 = -\gamma_1 \phi_1 - \gamma_2 \phi_2, \\ i\dot{\phi}_2 = \gamma_1 \phi_2 - \gamma_2 \phi_1. \end{cases}$$

де $\gamma_1 = \frac{\omega}{2} + \frac{\mu_n B'}{\hbar}$, $\gamma_2 = \frac{\mu_n B}{\hbar}$. Шукаючи розв'язок системи у вигляді

$$\phi_1(t) = C_1 e^{i\Omega t} + C_2 e^{-i\Omega t}, \quad \phi_2(t) = C_3 e^{i\Omega t} + C_4 e^{-i\Omega t}$$

одержимо систему рівнянь

$$\begin{cases} (\gamma_1 - \Omega) C_1 = -\gamma_2 C_3, \\ (\gamma_1 + \Omega) C_2 = -\gamma_2 C_4, \\ (\gamma_1 + \Omega) C_3 = \gamma_2 C_1, \\ (\gamma_1 - \Omega) C_4 = \gamma_2 C_2. \end{cases}$$

З перших двох рівнянь одержимо

$$C_3 = \frac{\Omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_1, \quad C_4 = -\frac{\Omega + \gamma_1}{\gamma_2} C_2.$$

Підставляючи ці співвідношення у два останніх рівняння одержимо одне й те саме рівняння (тобто одне з чотирьох рівнянь є залежним), яке визначає частоту Ω :

$$\Omega = \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}.$$

Тепер потрібно задовольнити початкові умови

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = 1, \\ C_3 + C_4 = 0. \end{cases}$$

Звідси випливає

$$C_1 = \frac{\Omega + \gamma_1}{2\Omega}, \quad C_2 = \frac{\Omega - \gamma_1}{2\Omega}, \quad C_3 = \frac{\gamma_2}{2\Omega}, \quad C_4 = -\frac{\gamma_2}{2\Omega}.$$

Отже, хвильова функція є

$$\Psi(t) = \frac{1}{2\Omega} \left(e^{-\frac{i\omega t}{2}} \left[(\Omega + \gamma_1) e^{i\Omega t} + (\Omega - \gamma_1) e^{-i\Omega t} \right] + 2i\gamma_2 \sin \Omega t e^{\frac{i\omega t}{2}} \right).$$

Ймовірність того, що в момент часу t спіні виявляться перевернутим, дорівнює

$$w_{\downarrow} = \frac{B^2 \sin^2 \Omega t}{B^2 + (B' + \hbar\omega / 2\mu_n)^2}.$$

У випадку коли $B \ll B'$ ця ймовірність мала. Проте якщо виконується умова $B' \approx -\hbar\omega / 2\mu_n$, то настає резонансне зростання ймовірності у вузькій смузі частот порядку $B\mu_n / \hbar$.

7.6. Потрібно використати (7.50), де $\langle r^2 \rangle = \int dr r^4 d\Omega |\psi_{1s}(r)|^2$.

Скориставшись (5.41) отримаємо $\langle r^2 \rangle = 4a_0^2 \int_0^\infty d\rho \rho^4 e^{-2\rho} = 3a_0^2$, де

a_0 - радіус Бора. Тоді

$$\chi_{l=0} = -\frac{e^2}{2Mc^2} a_0^2.$$

7.7. Потенціал представляє суму потенціалу гармонічного осцилятора $U_1(\vec{x}) = (\kappa/2)\vec{x}^2$ та взаємодії диполя з електричним полем $U_2(\vec{x}) = -q\vec{x} \cdot \vec{E}$, де q - заряд частинки. Рівняння Шрьодінгера буде

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{2} \kappa \vec{x}^2 - q\vec{x} \cdot \vec{E} \right) \psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}).$$

Зробимо заміну $\vec{x}' = \vec{x} - (q/\kappa)\vec{E}$. При цьому рівняння перетвориться на рівняння тривимірного гармонічного осцилятора із зсуненою енергією $E = E_{n_x n_y n_z} - \frac{q^2 E^2}{2\kappa}$, де $E_{n_x n_y n_z}$ було одержано в Задачі 5.3.

Тепер розв'яжемо задачу з допомогою теорії збурень. Матричний елемент для збурення легко одержати скориставшись формулою (Р.13), яку було одержано Задачі 6.3

$$\langle n'_x n'_y n'_z | H_1 | n_x n_y n_z \rangle = -qE \delta_{n'_x n_x} \delta_{n'_y n_y} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\kappa}} \left(\sqrt{n_z + 1} \delta_{n'_z - 1, n_z} + \sqrt{n_z - 1} \delta_{n'_z, n_z} \right).$$

Таким чином поправка до енергії першого порядку дорівнює нулю, $E^{(1)} = 0$. В другому порядку поправка є

$$E_{n_x n_y n_z}^{(2)} = \frac{\hbar\omega q^2 E^2}{4\kappa} \left(\frac{n_z + 1}{-\hbar\omega} + \frac{n_z - 1}{\hbar\omega} \right) = -\frac{q^2 E^2}{2\kappa}.$$

Таким чином результат у другому порядку теорії збурень співпадає з точним результатом.

8.1. Скориставшись формулою (Р.13) одержимо

$$W_{nm}(t) = -qE(t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n} \delta_{n-1, m} + \sqrt{n+1} \delta_{n+1, m} \right).$$

Таким чином збуджуються лише сусідні рівні. Ймовірність переходів дорівнює

$$w_{nm} = \frac{q^2}{2m\hbar\omega} \begin{cases} I_+(n+1), & m = n+1, \\ I_-(n), & m = n-1, \end{cases}$$

$$\text{де } I_{\pm} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{\pm i\omega t} dt \right|^2 = \pi t_0^2 E^2 e^{-\omega^2 t_0^2 / 2}.$$

8.2. В довільний момент часу хвильова функція квантового стану є

$$\Psi(\vec{x}, t) = c_1 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1 - i\Gamma_1/2)t} \psi_1(\vec{x}) + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - i\Gamma_2/2)t} \psi_2(\vec{x}),$$

де $\psi_1(\vec{x})$ та $\psi_2(\vec{x})$ дві ортонормовані функції, а $\Gamma_1 = \hbar/\tau_1$ та $\Gamma_2 = \hbar/\tau_2$ - ширини станів 1 та 2. Амплітуда ймовірності того, що в момент часу $t > 0$ квантова система перебуває в тому самому

стані, в якому вона перебувала в момент часу $t=0$ є такий інтеграл перекриття

$$A(t) = \int \Psi^*(\vec{x}, 0) \Psi^*(\vec{x}, t) d^3x = |c_1|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1 - i\Gamma_1/2)t} + |c_2|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - i\Gamma_2/2)t}.$$

Ймовірність відповідно є

$$W(t) = |A(t)|^2 = |c_1|^4 e^{-\Gamma_1 t/\hbar} + |c_2|^4 e^{-\Gamma_2 t/\hbar} + 2|c_1|^2 |c_2|^2 e^{-(\Gamma_1 + \Gamma_2)t/(2\hbar)} \cos \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}.$$

9.1. Усього для двох частинок із спіном s маємо $(2s+1)^2$ спінових станів, яким відповідають хвильові функції $\chi_{m_1}^{(1)} \chi_{m_2}^{(2)}$. З цих хвильових функцій, які у загальному випадку не мають певної симетрії, можна побудувати симетричні та антисиметричні функції.

Якщо $m_1 \neq m_2$ то симетрична та антисиметрична хвильові функції будуть

$$\chi_{\text{сим}}(m_1, m_2) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\chi_{m_1}^{(1)} \chi_{m_2}^{(2)} + \chi_{m_2}^{(1)} \chi_{m_1}^{(2)} \right),$$

$$\chi_{\text{а.с.}}(m_1, m_2) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\chi_{m_1}^{(1)} \chi_{m_2}^{(2)} - \chi_{m_2}^{(1)} \chi_{m_1}^{(2)} \right).$$

Для кожної з них маємо $s(s+1)$ стани.

У випадку, коли $m_1 = m_2$, симетричними хвильовими функціями будуть $\chi_{\text{сим}}(m, m) = \chi_m^{(1)} \chi_m^{(2)}$. Таких станів маємо $2s+1$. Таким чином, усього симетричних функції буде $(s+1)(2s+1)$, а антисиметричних $s(2s+1)$.

У випадку $s=1/2$ проекція спіну має два значення $+1/2$, та $-1/2$, які далі будемо позначати «+» і «-». При цьому маємо лише один антисиметричний стан

$$\chi_0^{\text{а.с.}}(1, 2) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)} \right)$$

і три симетричних стани

$$\chi_{\text{сим}}(+,+) = \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)}, \quad \chi_{\text{сим}}(+,-) = \sqrt{\frac{1}{2}} (\chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)}),$$

$$\chi_{\text{сим}}(-,-) = \chi_-^{(1)} \chi_-^{(2)}.$$

Антисиметричний стан відповідає $S = 0$, а симетричні відповідають $S = 1$.

9.2. Якщо розглядати протон та нейтрон як два зарядових стани нуклона, то маємо три типи змінних: координати, спінові змінні та зарядові стани. Останні у ядерній фізиці називають ізотопічними змінними. Розділяючи ці змінні хвильову функцію двонуклонної системи можна записати як

$$\Psi(1,2) = \chi(m_1, m_2) \phi(N_1, N_1) \psi(\vec{r}),$$

де $\chi(m_1, m_2)$ - спінова функція (відповідні змінні m_1 та m_2 - проекції спіну нуклонів), $\phi(N_1, N_2)$ - ізотопічна функція (її змінні приймають значення N_1 та $N_2 = p, n$) та координатна функція $\psi(\vec{r})$. Остання описує відносне положення двох нуклонів і залежить від їх відносної координати $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$.

Згідно умові задачі двонуклонна система знаходиться у S -стані і тому її координатна хвильова функція симетрична при заміні $1 \leftrightarrow 2$. Тому згідно з узагальненим принципом Паулі антисиметричним має бути добуток $\chi(m_1, m_2) \phi(N_1, N_1)$. Таким чином спінова та ізотопічна хвильові функції мають різну симетрію. Симетрична та антисиметричні спінові хвильові функції були побудовані у попередній задачі. Ізотопічні хвильові функції з певною симетрією є такі

- симетрична - $\phi_{\text{сим}}(p, p), \phi_{\text{сим}}(p, n), \phi_{\text{сим}}(n, n)$,
- антисиметрична - $\phi_{\text{а.с.}}(p, n)$.

Таким чином, якщо спін $S = 0$ (спінова функція антисиметрична), то двонуклонна система може існувати у трьох зарядових станах, pp , pn та nn . Якщо спін $S = 1$, то система може існувати лише у одному зарядовому стані pn .

9.3. В зв'язку з законом збереження моменту кількості руху повний момент двох π -мезонів в системі спокою ρ^0 -мезона дорівнює $j=1$. Так як спін π -мезона дорівнює нулю, то j складається лише з орбітального моменту, $j=l=1$. Таким чином хвильова функція двох π -мезонів є

$$Y_{1m}(\theta, \varphi)\phi(r).$$

Вона є антисиметричною при перестановці π -мезонів (нагадаємо, що $Y_{lm} \rightarrow (-1)^l Y_{lm}$ при $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$).

З другого боку, так як π -мезони є бозонами, то хвильова функція двох π^0 -мезонів має бути симетричною. Тому розпад $\rho^0 \rightarrow \pi^0 + \pi^0$ заборонений законом збереження моменту кількості руху.

У системі $\pi^+\pi^-$ частинки не тотожні і тому на них не потрібно накладати умову симетрії. Отже вищенаведені міркування не проходять і розпад $\rho^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$ не заборонений.

10.1. Використовуючи визначення оператора координати через оператори наро та знищення (10.47) та комутаційні співвідношення (10.46) отримаємо:

$$\begin{aligned} \langle n | x^2 | n \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 | n \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 | n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

Тепер розрахуємо $\langle n | x^4 | n \rangle$. Використовуючи (10.50) маємо

$$\begin{aligned}
\langle n|x^4|n\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4|n\rangle = \\
&= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|(\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger \hat{a})^2 + \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a} + \\
&\quad + \hat{a}^\dagger \hat{a}^2 \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2 (\hat{a}^\dagger)^2 |n\rangle.
\end{aligned}$$

Використовуючи комутаційні співвідношення отримаємо

$$\begin{aligned}
(\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a}^2 &= (\hat{a}^\dagger \hat{a})^2 - \hat{a}^\dagger \hat{a}, \\
\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a} &= (\hat{a}^\dagger \hat{a})^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a}, \\
\hat{a}^\dagger \hat{a}^2 \hat{a}^\dagger &= (\hat{a}^\dagger \hat{a})^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a}, \\
\hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger &= (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1)^2 = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^2 + 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1, \\
\hat{a}^2 (\hat{a}^\dagger)^2 &= \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^2 + 3\hat{a}^\dagger \hat{a} + 2.
\end{aligned}$$

В результаті

$$\begin{aligned}
\langle n|x^4|n\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4|n\rangle = \\
&= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|6(\hat{a}^\dagger \hat{a})^2 + 6\hat{a}^\dagger \hat{a} + 3|n\rangle = 3 \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (2n^2 + 2n + 1),
\end{aligned}$$

що співпадає з результатом одержаним в Задачі 6.3.

10.2. Спочатку розглянемо випадок бозонів. Запишемо умову канонічності перетворення $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. Тоді

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= [A\hat{a} + B\hat{a}^\dagger, A\hat{a}^\dagger + B\hat{a}] = \\
&= A^2 [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + AB [\hat{a}, \hat{a}] + AB [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] + B^2 [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = \\
&= A^2 - B^2 = 1.
\end{aligned}$$

Тобто $A = \text{ch}\alpha$, $B = \text{sh}\alpha$, де параметр α довільний.

У випадку ферміонів маємо дві умови канонічності $\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = 1$ та $\{\hat{a}, \hat{a}\} = 0$. З першої умови витікає $A^2 + B^2 = 1$, а з другої $AB = 0$. Таким чином маємо лише тривіальні розв'язки $A = \pm 1, B = 0$, або $A = 0, B = \pm 1$.

10.3. Скористуємось умовою повноти станів $|n\rangle$ і розложимо новий вакуум $|\tilde{0}\rangle$ по цим станам

$$|\tilde{0}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle,$$

де на коефіцієнти C_n потрібно наложити умову нормування

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n^2 = 1.$$

Для того, щоб $|\tilde{0}\rangle$ був вакуумним станом для нових бозонів потрібно вимагати

$$\hat{a}|\tilde{0}\rangle = 0,$$

звідки випливає

$$(A\hat{a} + B\hat{a}^\dagger)|\tilde{0}\rangle = A \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{n} |n-1\rangle + B \sum_{n=0}^{\infty} C_n \sqrt{n+1} |n+1\rangle = 0.$$

Зробимо заміну $n-1 \rightarrow n$ в першій сумі і $n+1 \rightarrow n$ в другій сумі

$$AC_1|0\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} (A\sqrt{n+1}C_{n+1} + B\sqrt{n}C_{n-1})|n\rangle = 0.$$

Звідси одержимо

$$C_1 = 0, \text{ та } C_{n+1} = -\frac{B}{A} \sqrt{\frac{n}{n+1}} C_{n-1},$$

або

$$C_n = \begin{cases} \left(-\frac{B}{A}\right)^k \sqrt{\frac{(2k-1)!!}{2^k k!}} C_0, & \text{при } n = 2k, \\ 0, & \text{при } n = 2k+1. \end{cases}$$

Коефіцієнт C_0 визначається з умови нормування $C_0 = \sqrt{1/A}$,

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n^2 = C_0^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{2^k k!} \left(\frac{B}{A}\right)^{2k} = \frac{1}{\sqrt{1-(B/A)^2}} = AC_0^2 = 1.$$

Фізичний зміст коефіцієнтів C_n полягає у тому, що вони представляють амплітуду ймовірності знайти у новому вакуумі n старих бозонів. Тому відповідні ймовірності є $w_n = C_n^2$.

11.1. Скористаємось формулою (11.42) для розсіяння на центральному потенціалі:

$$\begin{aligned} A^{(B)}(E, \theta) &= -\frac{\mu U_0}{\hbar^2 q} \int_0^{r_0} dr r \sin qr = \frac{\mu U_0}{\hbar^2 q} \frac{\partial}{\partial q} \int_0^{r_0} dr \cos qr = \\ &= \frac{2\mu U_0}{\hbar^2 q^3} [r_0 q \cos(r_0 q) - \sin(r_0 q)], \end{aligned}$$

де $q = \sqrt{\frac{8\mu E}{\hbar^2}} \sin \frac{\theta}{2}$. Диференційний переріз буде:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu U_0}{\hbar^2 q^3} \right)^2 [r_0 q \cos(r_0 q) - \sin(r_0 q)]^2.$$

При $r_0 q \ll 1$ покладемо $\cos(r_0 q) \approx 1 - \frac{1}{2}(r_0 q)^2$ і $\sin(r_0 q) \approx r_0 q - \frac{1}{6}(r_0 q)^3$. Тоді отримаємо $A^{(B)} = \frac{2\mu U_0}{3\hbar^2} r_0^3$. Тобто амплітуда розсіяння не залежить від кута розсіяння. Це означає, що розсіяння при низьких енергіях відбувається у парціальній s -хвилі.

При $r_0 q \ll 1$ другим доданком у виразі для амплітуди розсіяння можна знехтувати і одержимо $A^{(B)} \approx -\frac{r_0 U_0}{4E} \frac{\cos(r_0 q)}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}$.

11.2. Розглянемо рівняння (11.52) для парціальної s -хвилі поклавши в ньому $\Phi_{k_0}(r) = \frac{1}{r} R_{k_0}(r)$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} U(r) + k^2 \right] R_{k_0}(r) = 0.$$

Його розв'язок для потенціалу сферичної сходинки є

$$R_{k_0}(r) = \begin{cases} \phi_1(r, k) & \text{при } r < r_0, \\ \phi_2(r, k) & \text{при } r > r_0, \end{cases}$$

де

$$\phi_1(r, k) = N_1 \sin(\kappa r), \text{ та } \phi_2(r, k) = N_2 \sin[kr + \delta_0(k)],$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2\mu(E + U_0)}{\hbar^2}}.$$

З умови зшивки у точці $r = r_0$ випливає

$$\frac{1}{\phi_1(r_0, k)} \frac{d\phi_1(r_0, k)}{dr} = \frac{1}{\phi_2(r_0, k)} \frac{d\phi_2(r_0, k)}{dr},$$

або

$$\kappa \operatorname{ctg}(\kappa r_0) = k \operatorname{ctg}[kr_0 + \delta_0(k)].$$

Звідси одержимо фазовий зсув

$$\delta_0(k) = -kr_0 + \operatorname{arccctg} \left[\frac{\kappa}{k} \operatorname{ctg}(\kappa r_0) \right].$$

12.1. Нагадаємо, що оператор Гамільтона для діраковської частинки є $\hat{H} = c\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \beta mc^2$. Тоді

$$[\hat{H}, \hat{p}_i] = c\vec{\alpha} \cdot [\hat{\vec{p}}, \hat{p}_i] = 0,$$

$$[\hat{H}, \hat{l}_i] = c\alpha_j [\hat{p}_j, \hat{l}_i] = c\alpha_j \varepsilon_{ikm} [\hat{p}_j, x_k \hat{p}_m] = \frac{\hbar c}{i} (\vec{\alpha} \times \hat{\vec{p}})_i,$$

$$[\hat{H}, \hat{l}^2] = [\hat{H}, \hat{l}_i] \hat{l}_i + \hat{l}_i [\hat{H}, \hat{l}_i] = \frac{\hbar c}{i} \left[(\vec{\alpha} \times \hat{\vec{p}}) \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}} \cdot (\vec{\alpha} \times \hat{\vec{p}}) \right].$$

12.2. $[\hat{H}, \Sigma_i] = \hat{c}\hat{p} \cdot [\vec{\alpha}, \Sigma_i]$. Використовуючи явний вигляд операторів Σ_i

$$\begin{aligned} [\alpha_j, \Sigma_i] &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & [\sigma_j, \sigma_i] \\ [\sigma_j, \sigma_i] & 0 \end{pmatrix} = 2i\varepsilon_{jik}\alpha_k. \end{aligned}$$

Таким чином $[\hat{H}, \Sigma_i] = 2ic(\vec{\alpha} \times \hat{p})_i \neq 0$.

$$\vec{\Sigma}^2 = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} = 3, \text{ тобто } \hat{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \text{ є просто число, яке,}$$

звичайно, комує з будь-яким оператором.

12.3. Використовуючи результати попередніх задач

$$[\hat{H}, \hat{j}_i] = [\hat{H}, \hat{s}_i] + [\hat{H}, \hat{l}_i] = 0.$$

$$\text{Звідси легко одержимо } [\hat{H}, \hat{j}^2] = 0.$$

В зв'язку з тим, що оператор імпульсу комує з гамільтоніаном, для комутатора з оператором спіральності маємо:

$$[\hat{H}, \hat{n} \cdot \vec{\Sigma}] = \frac{\hat{p}}{p} \cdot [\hat{H}, \vec{\Sigma}] = 2ic \frac{\hat{p}}{p} \cdot (\vec{\alpha} \times \hat{p}) = 0.$$

Одержані в цих задачах комутаційні співвідношення говорять, що разом з енергією можна виміряти імпульс, повний момент імпульсу, його проекцію, а також спіральність діраковської частинки. Проте не можна виміряти проекцію спіна, орбітальний момент та його проекцію.

12.4. Підставимо у вираз для похідної від оператора імпульсу

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

гамільтоніан $\hat{H} = c\vec{\alpha} \cdot \hat{\pi} + \beta mc^2 + q\Phi$ [див. (12.72)]. В результаті маємо

$$\frac{d\hat{\pi}_i}{dt} = -\frac{q}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} c \sum_{j=1}^3 \alpha_j [\hat{\pi}_j, \hat{\pi}_i] - q \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}.$$

Розраховуючи комутатор

$$[\hat{\pi}_j, \hat{\pi}_i] = \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{q}{c} A_j, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{q}{c} A_i \right] = \frac{\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} B_k$$

одержимо остаточно

$$\frac{d\hat{\pi}}{dt} = q \left(-\frac{\partial \bar{A}}{\partial t} - \nabla \Phi + \bar{\alpha} \times \bar{B} \right) = q \left(\bar{E} + \frac{1}{c} \hat{v} \times \bar{B} \right).$$

12.5. Розглянемо стаціонарний стан $\Psi(r, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(r)$. Тоді рівняння для квазінезалежного кварка буде

$$\left[\gamma_0 E - \frac{\hbar c}{i} \vec{\gamma} \cdot \nabla - \frac{1 + \gamma_0}{2c} V(r) \right] \psi(r) = 0.$$

Розкладемо хвильову функцію по "верхніх" та "нижніх" компонентах

$$\psi(r) = \begin{pmatrix} \varphi(r) \\ \chi(r) \end{pmatrix}.$$

При цьому рівняння для квазінезалежного кварка зведеться до системи двох рівнянь

$$\begin{cases} [E - V(r)] \varphi(r) = \frac{\hbar c}{i} \vec{\sigma} \cdot \nabla \chi(r), \\ E \chi(r) = \frac{\hbar c}{i} \vec{\sigma} \cdot \nabla \varphi(r). \end{cases}$$

З другого рівняння одержимо $\chi(r) = \frac{\hbar c}{i} \frac{\vec{\sigma} \cdot \nabla}{E} \varphi(r)$. Підставивши цей вираз у перше рівняння отримаємо рівняння на функцію $\varphi(r)$

$$(\hbar c)^2 \Delta \varphi(r) + E [E - V(r)] \varphi(r) = 0$$

(тут ми скористались тотожністю $(\vec{\sigma} \cdot \nabla)^2 = \Delta$).

Тепер розглянемо лінійно зростаючий потенціал. Зробивши заміну $\varphi(r) = \frac{1}{r}\phi(r)$ перейдемо до радіальної функції $\phi(r)$. Для неї рівняння буде

$$(\hbar c)^2 \phi''(r) + E(E - V_0 - \lambda r)\phi(r) = 0$$

з граничними умовами

$$\phi(0) = 0 \text{ та } \phi(\infty) = 0.$$

З допомогою заміни

$$\rho = \beta \left(r - \frac{E - V_0}{\lambda} \right), \text{ де } \beta = \sqrt[3]{\frac{E\lambda}{(\hbar c)^2}}$$

це рівняння зведеться до

$$\phi''(\rho) = \rho\phi(\rho).$$

Його розв'язок, який спадає при $\rho \rightarrow \infty$, є функція Ейрі першого роду

$$\phi(\rho) = \text{Ai}(\rho).$$

Тепер потрібно задовольнити умові $\phi|_{r=0} = 0$. Вона зводиться до умови $\rho|_{r=0} = a_n$, де $n = 1, 2, 3, \dots$, а a_n - положення n -го нуля функції Ейрі (див. Додаток А). З другого боку, ця умова приводить до квантування енергії кварка

$$E_{n-1} = V_0 - \frac{a_n \lambda}{\beta_n}, \text{ де } \beta_n = \sqrt[3]{\frac{E_{n-1} \lambda}{(\hbar c)^2}}.$$

Це рівняння може бути розв'язано чисельними методами.

Маса протона виражається як

$$m_p c^2 = 3E_0.$$

Перший радіальний збуджений стан протону (має назву резонанс Ропера) відповідає випадку, коли один з кварків знаходиться у першому збудженому стані. Маса резонансу Ропера визначається з формули

$$m^* c^2 = 2E_0 + E_1.$$

Тепер розглянемо осциляторний потенціал. В цьому випадку найнижчий стан відповідає хвильовій функції

$$\varphi(r) = \left(\frac{2\Omega}{\pi} \right)^{3/2} e^{-\Omega r^2}, \quad \text{де} \quad \Omega = \frac{\sqrt{E_0 \lambda}}{2},$$

а енергія $E_0 = V_0 + \frac{6\Omega}{E_0}$. Це рівняння знову може бути розв'язано лише чисельними методами.

Додаток: Важливі математичні формули

А. Функції Ейрі

Функції Ейрі

$$\begin{aligned} \text{Ai}(x) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{z^3}{3} + xz\right) dz \\ \text{Bi}(x) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{z^3}{3} + xz\right) + \sin\left(\frac{z^3}{3} + xz\right) \right] dz \end{aligned} \quad (\text{Д.1})$$

представляють два часткових розв'язки диференціального рівняння

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - x\right) f(x) = 0. \quad (\text{Д.2})$$

При $x \rightarrow +\infty$ асимптотична поведінка функцій Ейрі наступна

$$\begin{aligned} \text{Ai}(x) &\approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{2\sqrt[4]{x}} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right), & \text{при } x \rightarrow +\infty, \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{-x}} \sin\left(\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right), & \text{при } x \rightarrow -\infty, \end{cases} \\ \text{Bi}(x) &\approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{x}} \exp\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right), & \text{при } x \rightarrow +\infty, \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{-x}} \cos\left(\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right), & \text{при } x \rightarrow -\infty. \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{Д.3})$$

Функції Ейрі мають нулі при від'ємних значеннях аргумента, $\text{Ai}(a_n) = 0$ та $\text{Bi}(b_n) = 0$. Наведемо положення трьох перших нулів функцій Ейрі

$$\begin{aligned} a_1 &= -2,3381 & b_1 &= -1,1737 \\ a_2 &= -4,0879 & b_2 &= -3,2711 \\ a_3 &= -5,5205 & b_3 &= -4,8307 \end{aligned}$$

Інші властивості функцій Ейрі можна знайти в довіднику [12].

Б. Поліноми та приєднані поліноми Лежандра

Приєднані поліноми Лежандра визначаються як

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{\sin^m \theta}{2^l l!} \frac{d^{m+l}}{(d \cos \theta)^{m+l}} (\cos^2 \theta - 1)^l, \quad (\text{Д.4})$$

де $m = 0, 1, 2, \dots, l$. Вони задовольняють диференціальне рівняння

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d \sin \theta} \left(\sin \theta \frac{dP_l^m}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_l^m = 0. \quad (\text{Д.5})$$

В тому випадку, коли $m = 0$, приєднані поліноми Лежандра називають просто поліномами Лежандра та позначають $P_l(\cos \theta)$

$$P_l(\cos \theta) = P_l^0(\cos \theta).$$

Поклавши в (Д.4) $m = 0$ одержимо явний вигляд найнижчих поліномів Лежандра

$$\begin{aligned} P_0(u) &= 1; & P_1(u) &= u; \\ P_2(u) &= \frac{1}{2}(3u^2 - 1); & P_3(u) &= \frac{1}{2}(5u^3 - 3u). \end{aligned} \quad (\text{Д.6})$$

де введено позначення $u = \cos \theta$.

Приєднані поліноми Лежандра задовольняють наступній умові ортогональності

$$\int_{-1}^1 du P_l^m(u) P_l^m(u) = \delta_{ll} \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!}, \quad (\text{Д.7})$$

Серед важливих властивостей приєднаних поліномів Лежандра, які використовуються в квантовій механіці, відмітимо рекурентні формули для приєднаних поліномів Лежандра

$$u P_l^m(u) = \frac{1}{(2l+1)} \left[(l-m+1) P_{l+1}^m(u) + (l+m) P_{l-1}^m(u) \right], \quad (\text{Д.8})$$

$$\sqrt{1-u^2} P_l^{m-1}(u) = \frac{1}{2l+1} \left[P_{l+1}^m(u) - P_{l-1}^m(u) \right]. \quad (\text{Д.9})$$

Для повноти викладення варто відмітити теорему додавання. Нехай два напрями задані векторами

$$\begin{aligned}\vec{n}_1 &= (\sin \theta_1 \cos \varphi_1, \sin \theta_1 \sin \varphi_1, \cos \theta_1), \\ \vec{n}_2 &= (\sin \theta_2 \cos \varphi_2, \sin \theta_2 \sin \varphi_2, \cos \theta_2)\end{aligned}\tag{Д.10}$$

і α - кут між ними, тоді має місце співвідношення

$$P_l(\cos \alpha) = P_l(u_1)P_l(u_2) + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(u_1)P_l^m(u_2) \cos m(\varphi_1 - \varphi_2).\tag{Д.11}$$

В деяких задачах зручно використовувати розклад $|\vec{r} - \vec{r}'|^{-1}$ по поліномам Лежандра

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \begin{cases} \frac{1}{r'} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r}{r'}\right)^l P_l(\cos \theta), & \text{при } r < r', \\ \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r}\right)^l P_l(\cos \theta), & \text{при } r > r', \end{cases}\tag{Д.12}$$

де θ - кут між векторами \vec{r} та \vec{r}' .

В. Сферичні функції Бесселя

Сферичні функції Бесселя першого і другого роду виражаються через звичайні функції Бесселя напівцілого порядку

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x), \quad y_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{l+\frac{1}{2}}(x).\tag{Д.13}$$

В свою чергу, $J_\nu(x)$ і $Y_\nu(x)$ - функції Бесселя першого та другого роду. Вони являються частковими розв'язками рівняння Бесселя

$$x^2 F''(x) + xF'(x) + (x^2 - \nu^2)F(x) = 0.$$

Функції Бесселя першого роду можна записати як такий ряд

$$J_\nu(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu}}{m! \Gamma(m+\nu+1)},$$

де $\Gamma(z)$ – Γ -функція, яка визначається згідно формулі (Д.20). Функції Бесселя другого роду (їх також називають функціями Неймана) записуються як лінійна комбінація

$$Y_\nu(x) = \frac{J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin(\nu\pi)}.$$

Існують також функції Бесселя третього роду, $H_\nu^{(1)}(x)$ та $H_\nu^{(2)}(x)$, які також є розв'язками рівняння Бесселя. Їх ще називають першою та другою функціями Ганкеля. Вони таким чином виражаються через функції Бесселя першого роду

$$H_\nu^{(1)}(x) = \frac{J_{-\nu}(x) - J_\nu(x)e^{-i\nu\pi}}{i \sin(\nu\pi)},$$

$$H_\nu^{(2)}(x) = \frac{J_\nu(x)e^{i\nu\pi} - J_{-\nu}(x)}{i \sin(\nu\pi)}.$$

Формули Релея дозволяють розрахувати сферичні функції Бесселя у явному вигляді

$$j_l(x) = x^l \left(-\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}, \quad (\text{Д.14})$$

$$y_l(x) = -x^l \left(-\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x}. \quad (\text{Д.15})$$

Асимптотична поведінка:

- при $x \rightarrow 0$

$$j_l(x) \approx \frac{x^l}{(2n+1)!!}, \quad y_l(x) \approx -\frac{x^{-(l+1)}}{(2n-1)!!}; \quad (\text{Д.16})$$

- при $x \gg 1$

$$j_l(x) \approx \frac{\sin\left(x - \frac{\pi}{2}l\right)}{x}, \quad y_l(x) \approx -\frac{\cos\left(x - \frac{\pi}{2}l\right)}{x}. \quad (\text{Д.17})$$

Рекурентні формули

$$f_l(x) = \frac{x}{2l+1} [f_{l+1}(x) + f_{l-1}(x)], \quad (\text{Д.18})$$

$$f_l'(x) = -f_{l+1}(x) + \frac{l}{x} f_l(x). \quad (\text{Д.19})$$

де $f_l(x)$ - одна з сферичних функцій Бесселя.

Г. Деякі інтеграли, які зводяться до Γ - функції

В багатьох задачах ми зустрічаємось з інтегралами типу $\int_0^{\infty} dx x^n e^{-ax}$, та $\int_0^{\infty} dx x^n e^{-ax^2}$. За допомогою очевидних замін змінної вони зводяться до Γ - функції від цілого та напівцілого аргументу.

Γ - функція визначається як такий інтеграл

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dx x^{z-1} e^{-x}. \quad (\text{Д.20})$$

Як випливає з її означення, Γ - функція має важливу властивість

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z),$$

причому $\Gamma(1) = 1$ та $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$. Тому

$$\Gamma(n) = (n-1)!, \quad \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi}.$$

Докладніше про властивості спеціальних функцій див. [12].

ЛІТЕРАТУРА

Основана

[1] А.С.Давыдов, Квантовая механика. М.: «Мир», 1973. Є переклад на українську мову О.С.Давидов, Квантова механіка, Київ:«Академперіодика», 2012;

http://bitp.kiev.ua/files/doc/lectures/davydov_qm.pdf

[2] І.О.Вакарчук, Квантова механіка. Львів, вид. Львівського університету, 2004.

[3] Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика. Т.3. Квантовая механика. М. «Физматлит», 2001.

[4] В.Г.Левич, Ю.А.Вдовин и В.А.Мямлин, Курс теоретической физики. Т.ІІ. М.: «Наука», 1971.

[5] Д.И.Блохинцев, Основы квантовой механики. М.: «Высшая школа», 1963.

[6] Энрико Ферми, Квантовая механика. М.: «Мир», 1965.

[7] В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган, Задачи по квантовой механике. М.: «Наука», 1981.

[8] Сборник задач по теоретической физике. Л.Г.Гречко и др. М.: «Высшая школа», 1972.

[9] Л.Г.Гречко, С.М.Єжов та В.О.Сугаков. Збірник задач із теоретичної фізики. Квантова механіка. Вид. Київського національного університета ім. Тараса Шевченка, 2013.

[10] П.Е.Елютин и В.Д.Кривченков, Квантовая механика с задачами. М.: «Физматлит», 2001.

Допоміжна

[11] Дж.Д.Бьёркен и С.Д.Дрелл, Релятивистская квантовая теория. Т.1, М. «Наука», 1978.

[12] Г.Бейтмен и А.Эрдейи, Высшие трансцендентные функции. Т. 1 и 2, М.: «Наука», 1973.