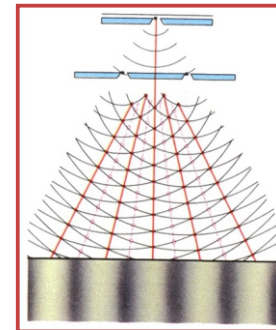


Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра
«Курчатовский институт»

В. В. Федоров

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА: ИСТОРИЯ, ПРИНЦИПЫ И ПРИЛОЖЕНИЯ

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ ДЛЯ АСПИРАНТОВ



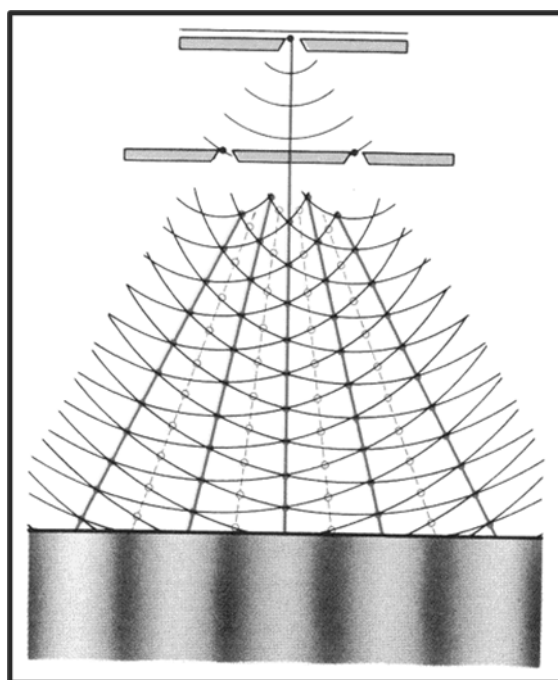
Гатчина
2025

Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра
«Курчатовский институт»

В. В. Федоров

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА: ИСТОРИЯ, ПРИНЦИПЫ И ПРИЛОЖЕНИЯ

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ ДЛЯ АСПИРАНТОВ



Гатчина
2025

УДК 530.145; 539.1
ББК 22.3Г; 22.38

Федоров Валерий Васильевич – доктор физико-математических наук, профессор.

*Печатается по решению Ученого совета НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
(протокол заседания от 24.10.2024 № 7).*

Федоров В. В. Квантовая механика: история, принципы и приложения. – Гатчина
Ленинградской обл.: Изд-во НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2025. – 346 с.

Необходимость вводного курса квантовой механики обусловлена тем, что в последнее время в магистратуру по физическим специальностям, таким как физика ядра и элементарных частиц или физика конденсированного состояния, где основным инструментом описания происходящих явлений является аппарат квантовой механики, стал возможным прием студентов, окончивших бакалавриат по специальностям, где курсы квантовой механики совсем не изучаются, хотя на физических факультетах вузов обычно на третьем и четвертом курсах квантовая механика читается в полном объеме, достаточном для дальнейшего изучения специальных дисциплин.

Основу данного учебного пособия составил курс лекций, прочитанных автором студентам первого курса магистратуры кафедры ядерно-физических методов исследования на физическом факультете в Санкт-Петербургском государственном университете и аспирантам НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ. Пособие посвящено главным принципам и закономерностям квантовой механики, которые дают основу для дальнейшего изучения явлений, происходящих в атомах, ядрах атомов и макроскопических телах.

В доступной для студентов и аспирантов, ранее не изучавших квантовую физику, форме рассмотрены классические задачи квантовой механики, основные свойства линейных операторов в применении к этим задачам, основы теории углового момента, стационарная и нестационарная теории возмущений, некоторые задачи о рассеянии частиц изолированным центром и пространственно-периодическими структурами. Все вычисления проводятся от начала и до конца без обращения к справочной литературе. Подробно изложена связь симметрий законов природы и законов сохранения. Рассказывается об истории создания квантовой теории.

Пособие предназначено для студентов и аспирантов, специализирующихся в области физики ядра и элементарных частиц, а также в физике конденсированного состояния вещества. Оно может заинтересовать и быть полезным школьникам старших классов и учителям средней школы.

Автор выражает глубочайшую признательность доктору физико-математических наук И. А. Митропольскому, взявшему на себя труд прочитать настоящее пособие, за замечания и плодотворные обсуждения.

© НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2025

Неожиданностью было видеть ночь среди
ясного дня в точках, которых свободно достигали
солнечные лучи, но кто бы мог подумать, что
свет, слагаясь со светом, может вызвать мрак!

Франсуа Араго

Глава 1. Об истоках происхождения идеи о волновых свойствах частиц

Начнем с вопроса о том, что такое свет: волна или частица. Этот вопрос является отголоском древнего спора философов о бесконечной делимости вещества или существовании его наименьшей неделимой части – атома. Рене Декарт (1596–1650), например, считал, что свет представляет собой некие вихревые движения в непрерывном эфире – это, скорее, философская, чем физическая концепция. Первую физическую волновую теорию (свет – продольные колебания невидимого эфира) предложил Христиан Гюйгенс в 1678 г. Исаак Ньютон (1705) выдвинул корпускулярную теорию: свет – это поток частиц – корпускул, при помощи которой он объяснил явления геометрической оптики и даже попытался дать объяснение обнаруженным им «кольцам Ньютона», которые, как показало будущее, были чисто волновым явлением.

1.1. Свет – это волна

Казалось, что именно такую окончательную точку в этом споре поставил Томас Юнг в январе 1800 г., представив Лондонскому королевскому обществу свой «мемуар», в котором он, рассматривая свет как поперечные волны в эфире, объяснил результаты своих опытов по дифракции и интерференции света. Это было убедительным доказательством его волновой природы.

В 1801–1803 гг. в статьях «Теория света и цветов» и «Опыты и исчисления, относящиеся к физической оптике» Юнг впервые ввел понятия *физической оптики* и *световой волны*. Однако окончательно волновая теория света утвердилась лишь после создания в 1861–1862 гг. Джеймсом Максвеллом теории электромагнетизма. Он показал, что свет – это поперечные электромагнитные волны (причем, вихревой природы – вспомним Декарта).

К концу XIX в. то, что свет – это поперечные электромагнитные волны, уже ни у кого не вызывало сомнений. Этому способствовали открытия, сделанные Генрихом Герцем (при помощи изобретенных им вибратора и резонатора, т. е. антенны и приемника электромагнитных волн), о которых он сообщил в работах: «Об очень быстрых электрических колебаниях» (1887), «Об электродинамических волнах в воздухе и их отражении» и «О лучах электрической силы» (1888), а также последующее лавинообразное развитие беспроводной телеграфии и радио (А. С. Попов (1895), Г. Маркони (1896)). Поэтому 1888 г. можно считать

годом открытия электромагнитных волн и экспериментального подтверждения волновой теории Максвелла.

Таким образом, к началу XX в. были получены очень убедительные доказательства, что *свет – это волна*.

1.2. Свет – поток частиц (корпускул)

Однако в 1887 г. тот же Герц при работе с открытым резонатором заметил, что если посветить ультрафиолетовым светом на цинковые пластины конденсатора, то он разряжается гораздо быстрее. Он описал эффект в статье «О влиянии ультрафиолетового света на электрический разряд» [1].

Это было открытие нового явления в физике, названного *фотоэффектом*. Суть его в том, что падающий на вещество свет, поглощаясь, выбивает из него электроны (двигаясь между обкладками, они и приводят к быстрой разрядке конденсатора). Дальнейшие исследования показали, что свойства фотоэффекта совершенно невозможно объяснить с точки зрения волновой теории света.

Так оказалось, что эффект носит пороговый характер по частоте световой волны. Электроны начинают вылетать из вещества, только если ее частота больше некоторой пороговой величины, позднее названной *красной границей фотоэффекта*, разной для разных веществ. Это обнаружил в 1888–1890 гг. Александр Григорьевич Столетов, назвав само явление актино-электрическим [2].

Более того, Филипп Ленард в 1900–1902 гг. обнаружил, что, вопреки классической электродинамике, энергия вылетающего электрона всегда определяется только частотой падающего света и практически не зависит от его интенсивности [3].

К началу XX в. накопился еще целый ряд наблюдений, которые не вписывались в рамки классических представлений.

1.3. Излучение абсолютно черного тела

В конце XIX в. имелись две формулы (Релея – Джинса и Вина), описывающие спектр частот теплового излучения (зависимость интенсивности излучения от его частоты или длины волны, см. рис. 1.1) абсолютно черного тела. Такое излучение имеет место, например, внутри полости в веществе с заданной температурой. Оно находится в тепловом равновесии с ее стенками (т. е. энергия электромагнитных волн, поглощаемая стенками, равна энергии излучаемых стенками волн). Его можно наблюдать и изучать, например, через узкое отверстие из этой полости.

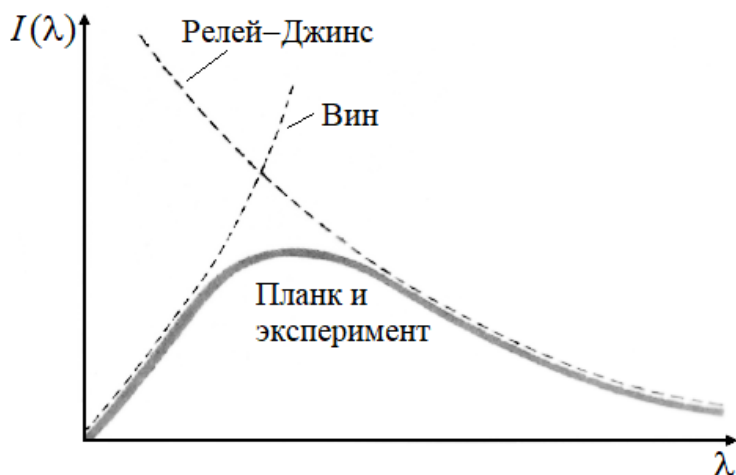


Рис. 1.1. Спектр длин волн λ -излучения абсолютно черного тела: *пунктирные кривые* – зависимости Релея – Джинса и Вина; *сплошная кривая* – зависимость Планка. Она согласуется с экспериментом во всей области длин волн. $I(\lambda)$ – интенсивность излучения длины волны λ в единичном интервале λ

Первая из этих формул, полученная Релеем и Джинсом, описывала экспериментальные данные в области низких частот спектра (большие длины волн), вторая, Вина, – в области высоких частот (малых длин волн), что показано на рис. 1.1, но ни одна из них не описывала всю экспериментальную кривую.

В 1900 г. Макс Планк вернулся к проблеме спектрального состава электромагнитного излучения, находящегося в равновесии со стенками полости при постоянной температуре. Атомы стенок полости (излучающие и поглощающие свет) представлялись им набором гармонических осцилляторов с круговой частотой ω . Чтобы полностью описать наблюдаемый спектр излучения, ему необходимо было допустить, что осцилляторы поглощают и испускают энергию не непрерывно, как следует из классических представлений, а порциями (квантами, или «атомами» света):

$$E_n = n\hbar\omega \equiv nh\nu, \quad (1.1)$$

где $\nu = \omega/2\pi$ – частота световой волны (кванта); $\hbar = 1,01 \cdot 10^{-27}$ эрг $\cdot$ с = $6,58 \cdot 10^{-16}$ эВ $\cdot$ с – константа, величину которой Планк нашел из сравнения полученного спектра с экспериментально наблюдаемым. Она называется *приведенной постоянной Планка*, в отличие от $h = 2\pi\hbar$, которая есть просто постоянная Планка. Подобная ситуация имеет место, например, при течении жидкости. Казалось бы, непрерывный поток на самом деле состоит из отдельных молекул или атомов, т. е. имеет, если его рассматривать с очень большим увеличением, дискретную структуру. То, что осцилляторы поглощают и излучают энергию квантами, означало, что они могут иметь не любые энергии, а только отличающиеся на величину $\hbar\omega$, т. е. энергии образуют дискретный набор. В результате Планк получил замечательное совпадение спектра излучения абсолютно черного тела, рассчитанного по его формуле, с экспериментальным во всем спектральном диапазоне (см. рис. 1.1).

День 14 декабря 1900 г., когда он на заседании Немецкого физического общества дал вывод найденной им формулы «черного» излучения [4], основываясь на совершенно новых физических идеях о квантах света и дискретности энергий, Арнольд Зоммерфельд в своей классической книге «Строение атома и спектры», впервые изданной в 1927 г., назвал днем рождения квантовой теории.

1.4. Фотоэффект

Для объяснения фотоэффекта Альберт Эйнштейн в 1905 г. развил идею Планка о квантах света в статье «Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света» [5]. Он предположил, что пучок монохроматического света с частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k}$ представляет собой поток *частиц* – *фотонов* с энергией $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\mathbf{k}$. Тогда закон фотоэффекта есть просто закон сохранения энергии:

$$\hbar\omega = \varepsilon_{\text{св}} + \frac{mv_e^2}{2}, \quad (1.2)$$

т. е. при поглощении энергия фотона тратится на преодоление энергии связи $\varepsilon_{\text{св}}$ электрона в веществе (она же есть работа выхода электрона из вещества и красная граница фотоэффекта) и сообщение ему кинетической энергии $T_e = mv_e^2 / 2$. За объяснение фотоэффекта в 1921 г. Эйнштейну была присуждена Нобелевская премия.

Заметим, что длины волн видимого света лежат в пределах $3800 < \lambda < 7600 \text{ \AA}$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$), а энергии фотонов – $1,6 < \hbar\omega < 3,2 \text{ эВ}$. Для ультрафиолетового излучения длины волн $20 < \lambda < 3800 \text{ \AA}$, а энергии фотонов $3,2 < \hbar\omega < 100 \text{ эВ}$. Более коротковолновое излучение – это рентгеновские и γ -лучи.

Если энергия связи $\varepsilon_{\text{св}}$ внутренних электронов в веществе значительно меньше энергии фотона $\hbar\omega$, вызывающего фотоэффект, энергия вырываемого электрона будет практически равна энергии фотона:

$$\hbar\omega = \varepsilon_{\text{св}} + T_e \approx T_e. \quad (1.3)$$

Если фотон, поглощаясь электроном, выбивает его из вещества, то и электрон, останавливаясь в веществе (т. е. тормозясь в нем), должен излучать фотон (тормозное излучение). Хотя описать этот процесс довольно сложно и спектр излучения сплошной (рис. 1.2), но закон сохранения энергии, безусловно, требует, чтобы максимальная энергия излучаемых фотонов удовлетворяла условию $\hbar\omega_m \approx T_e$, т. е. их спектр должен быть ограничен, энергия фотона не может быть больше энергии электрона T_e , а длина волны не может быть короче соответствующей граничной длины волны.

На рисунке 1.2 для иллюстрации приведен ряд сплошных спектров рентгеновского излучения от вольфрамового антикатада рентгеновской трубки при различных энергиях падающих на антикатод электронов. Энергия электронов задается разницей потенциалов U на электродах трубки.

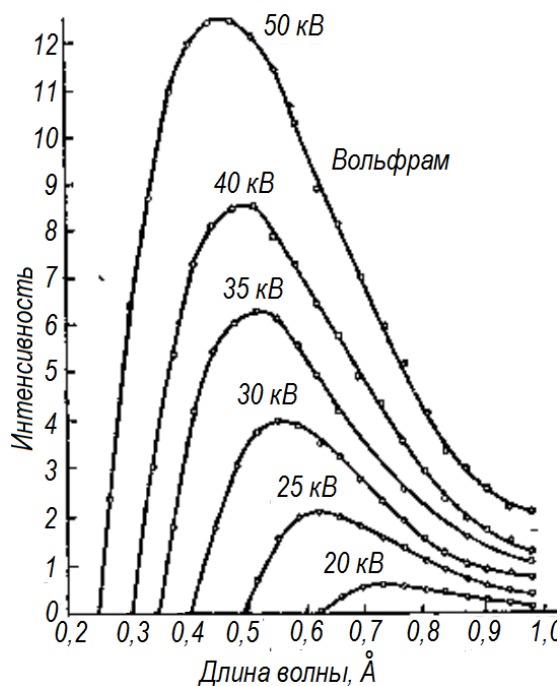


Рис. 1.2. Ряд сплошных спектров рентгеновского излучения от вольфрамового антикатада рентгеновской трубки, полученных при различных разностях потенциалов U на ее электродах. Кинетическая энергия электронов, падающих на антикатод, равна $T_e = eU$

Видно, что каждый из приведенных на рис. 1.2 спектров резко ограничен со стороны коротких длин волн, причем было найдено, что

$$\lambda_{\min} U = \text{const.}$$

Это равенство тождественно совпадает с законом $\hbar\omega_{\max} = eU$. Действительно,

$$\omega_{\max} = \frac{2\pi c}{\lambda_{\min}} = \frac{eU}{\hbar} \text{ и } \lambda_{\min} U = \frac{2\pi\hbar c}{e} = \text{const.} \quad (1.4)$$

Соотношение (1.4) применяется для определения *постоянной Планка*. Метод измерения постоянной Планка, основанный на определении коротковолновой границы рентгеновского спектра, является одним из наиболее точных.

1.5. Комптоновское рассеяние фотонов заряженными частицами

Еще одно проявление корпускулярности электромагнитных волн было обнаружено американским физиком Артуром Комптоном в 1922 г. при изучении рассеяния рентгеновских лучей на электронах (Нобелевская премия, 1927).

Комптон обнаружил, что длина волны рентгеновских лучей увеличивается, когда они рассеиваются электронами. Результаты своих опытов он опубликовал в статье [6], помещенной в бюллетене Национального исследовательского совета Академии наук США, вышедшем 20 октября 1922 г. В декабре он направил в журнал Phys. Rev. статью [7] с объяснением эффекта, которая была опубликована лишь в майском номере журнала за 1923 г.

Тем временем из Цюриха 10 марта 1923 г. в редакцию журнала Physikalische Zeitschrift поступила статья Петера Дебая «Рассеяние рентгеновских лучей и квантовая теория» [8] с результатами, полученными им несколько ранее, но которую он решил опубликовать, только узнав о результатах опытов Комптона.

Номер с этой статьей вышел 15 апреля 1923 г. Так что известная формула, описывающая изменение длины волны рентгеновских лучей при комптоновском рассеянии массивной частицей, получена практически одновременно Дебаем и Комптоном из квантовых представлений о природе света и носит название *формулы Дебая – Комптона*.

Только открытие эффекта Комптона окончательно убедило физиков в существовании квантов света, т.е. в том, что электромагнитная волна может проявлять корпускулярные свойства – вести себя как частица с нулевой массой.

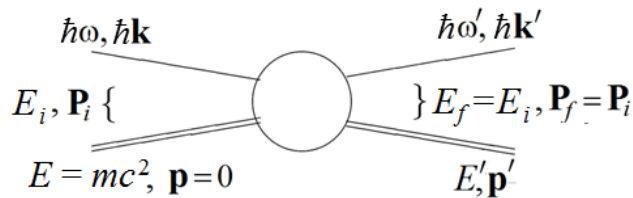


Рис. 1.3. Графическое изображение процесса столкновения фотона – частицы с энергией $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\mathbf{k}$ с другой (заряженной) частицей, например электроном с энергией E и импульсом $\mathbf{p}$

На рисунке 1.3 изображен процесс рассеяния кванта (фотона) с энергией $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\mathbf{k}$ (причем $\omega = kc$) на покоящейся заряженной частице с энергией $E = mc^2$ и импульсом $\mathbf{p} = 0$. В результате столкновения с фотоном (т. е. частицей с энергией $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\mathbf{k}$ и нулевой массой) частица приобретает кинетическую энергию и импульс, тогда как фотон их теряет (отдает частице). Заметим, что при фотоэффекте фотон передает электрону всю свою энергию.

Законы сохранения энергии и импульса для случая рассеяния имеют вид

$$\hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + E', \quad \hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}' + \mathbf{p}', \quad (1.5)$$

с учетом связи между энергией и импульсом частиц (законов дисперсии) для частицы с массой $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ и для фотона $\hbar\omega = c\hbar k$ дают упомянутую выше формулу Дебая – Комптона

$$\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos\theta) \equiv \lambda_c(1 - \cos\theta) \geq 0. \quad (1.6)$$

Она описывает «покраснение» фотона (увеличение его длины волны) в результате рассеяния на электроне. Эта формула (и сам эффект комптоновского смещения частоты, т. е. изменения энергии фотона в результате рассеяния) является существенно квантовой. В классическом пределе, который, как мы увидим далее, достигается при $\hbar \rightarrow 0$, изменение длины волны фотона при рассеянии исчезает, что и имеет место в классической электродинамике.

Величина

$$\lambda_c = 2\pi\hbar / mc \equiv 2\pi\tilde{\lambda}_c \quad (1.7)$$

носит название *комптоновской длины волны частицы*; $\tilde{\lambda}_c$ – ее приведенная комптоновская длина волны.

1.6. Вывод формулы Дебая – Комптона

Для упрощения вычислений законы сохранения и уравнения дисперсии удобно переписать в релятивистской четырехмерной форме.

Введем 4-импульсы частицы p_μ и фотона κ_μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) по аналогии с 4-вектором положения точки в 4-мерном пространстве-времени, определяемом ее координатами $x_\mu = (x_0, x_1, x_2, x_3) \equiv (ct, x, y, z)$:

$$p_\mu = (p_0, p_1, p_2, p_3) \equiv (E/c, \mathbf{p}),$$

$$\kappa_\mu = (\kappa_0, \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3) \equiv (\varepsilon/c, \mathbf{\kappa}),$$

где $\varepsilon = \hbar\omega$ и $\mathbf{\kappa} = \hbar\mathbf{k}$ – энергия и импульс фотона соответственно. При переходе из одной инерциальной системы отсчета в другую компоненты 4-векторов преобразуются точно так же, как компоненты 4-вектора x_μ .

Законы сохранения энергии и импульса при этом объединяются в закон сохранения 4-импульса:

$$p_\mu + \kappa_\mu = p'_\mu + \kappa'_\mu \text{ или } \kappa_\mu - \kappa'_\mu = p'_\mu - p_\mu. \quad (1.8)$$

Первое выражение (1.8) означает равенство полного 4-импульса (т. е. суммарной энергии и импульса) двух частиц до и после столкновения. Это эквивалентно тому, что убыль 4-импульса фотона должна быть равной приращению импульса частицы, что и отражает вторая формула (1.8).

Законы дисперсии для частицы с массой и фотона можно переписать в виде

$$\frac{E^2}{c^2} = \mathbf{p}^2 + m^2 c^2, \quad \frac{\hbar^2 \omega^2}{c^2} - \hbar^2 \mathbf{k}^2 = 0 \quad (1.9)$$

или

$$p_\mu^2 = m^2 c^2, \quad \kappa_\mu^2 = 0, \quad (1.10)$$

где мы определили квадраты длин 4-векторов как $p_\mu^2 = p_0^2 - \mathbf{p}^2$, $\kappa_\mu^2 = \kappa_0^2 - \mathbf{\kappa}^2$. Нулевые (временные) компоненты p_0 и κ_0 4-векторов импульсов p_μ и κ_μ равны

$$p_0 = E/c, \quad \kappa_0 = \varepsilon/c. \quad (1.11)$$

Греческими индексами мы здесь нумеруем компоненты 4-векторов, латинскими – компоненты обычных, трехмерных векторов. По повторяющимся индексам производим суммирование по правилу

$$a_\mu b_\mu = a_0 b_0 - a_i b_i = a_0 b_0 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3, \quad (1.12)$$

которое учитывает свойства 4-мерного пространства-времени, в котором скалярное произведение 4-векторов определяется как

$$ab \equiv a_\mu b_\mu = a_0 b_0 - \mathbf{a} \mathbf{b} = a_0 b_0 - a_i b_i. \quad (1.13)$$

Оно является скаляром, т. е. не зависит от выбора системы отсчета (является релятивистским инвариантом – его величина не изменяется при преобразованиях Лоренца). Соответствующим образом определяется и квадрат длины 4-вектора:

$$a^2 \equiv a_\mu^2 = a_\mu a_\mu = a_0^2 - a_i a_i = a_0^2 - \mathbf{a}^2. \quad (1.14)$$

Итак, возводя в квадрат вторую формулу (1.8) и учитывая законы дисперсии (1.10), имеем

$$m^2 c^2 - p_\mu p'_\mu = -\kappa'_\mu \kappa_\mu. \quad (1.15)$$

Принимая во внимание, что в лабораторной системе координат частица до столкновения с фотоном покоится, т. е. $\mathbf{p} = 0$ и $p_\mu = (p_0 = E/c, \mathbf{p} = 0)$, получаем

$$m^2 c^2 - \frac{EE'}{c^2} = -\left(\frac{\varepsilon\varepsilon'}{c^2} - \kappa\kappa' \cos \theta \right) = -\kappa\kappa'(1 - \cos \theta). \quad (1.16)$$

Учитывая, что $E = mc^2$, $E' = \varepsilon - \varepsilon' + mc^2$, $EE' = m^2 c^4 + mc^2(\varepsilon - \varepsilon')$, $\varepsilon = \kappa c$, получим

$$\kappa - \kappa' = \frac{\kappa\kappa'}{mc}(1 - \cos \theta). \quad (1.17)$$

Вспоминая формулу Эйнштейна, которая связывает частоту фотона с его энергией, получаем связь между импульсом фотона и его длиной волны (т. е. связь между волновыми корпускулярными свойствами света):

$$\kappa = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \quad (1.18)$$

Подставляя формулу (1.18) в выражение (1.7), получим формулу Дебая – Комптона

$$\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos \theta) \equiv \lambda_c(1 - \cos \theta), \quad (1.19)$$

где

$$\lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{mc} \equiv 2\pi\tilde{\lambda}_c - \quad (1.20)$$

комптоновская длина волны частицы,

$$\tilde{\lambda}_c = \frac{\hbar}{mc} - \quad (1.21)$$

приведенная комптоновская длина волны.

Итак, Эйнштейн показал, что электромагнитные волны в некоторых ситуациях ведут себя как частицы с массой, равной нулю, энергией $E = \hbar\omega$ и импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, причем если положить в релятивистской формуле для частицы

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4,$$

ее массу $m = 0$, то для безмассовой частицы получим $E = pc$ или соотношение $\omega = kc$, справедливое для электромагнитной волны.

1.7. Волны де Бройля

Луи де Бройль в 1923 г. пошел еще дальше (см. статью [9], переводы других его статей и ссылки на оригиналы можно найти в сборнике [10]). Он предположил, что частицы с массой точно так же, как и фотоны, могут проявлять волновые свойства, причем связь энергии и частоты, а также импульса и волнового вектора сохраняются, т. е. $E = \hbar\omega$, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ (Нобелевская премия, 1929).

Таким образом, любой частице соответствует волна с дебройлевской длиной волны:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (1.22)$$

которая определяется импульсом частицы, а частота и волновой вектор связаны релятивистским соотношением

$$\omega^2 = k^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \equiv k^2 c^2 + \frac{(2\pi)^2 c^2}{\lambda_c^2}. \quad (1.23)$$

Длину волны де Бройля можно выразить через кинетическую энергию частицы $E_k = E - mc^2$. Поскольку, как нетрудно видеть,

$$p^2 c^2 = (E - mc^2)(E + mc^2) = E_k (E_k + 2mc^2), \quad (1.24)$$

то

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{E_k (E_k + 2mc^2)}}. \quad (1.25)$$

В нерелятивистском пределе, т. е. при $E_k \ll mc^2$ (скорость частицы $v \ll c$), имеем

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}} = \frac{2\pi\hbar}{mv}. \quad (1.26)$$

В ультрарелятивистском пределе при $E_k \gg mc^2$ (т. е. $E_k \approx E$) формула (1.25) совпадает с формулой для фотона

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{E}. \quad (1.27)$$

Отложим пока на время гипотезу де Бройля и обсудим еще ряд наблюдавшихся явлений, которые противоречили представлениям классической физики. В статье [9] де Бройль также впервые указал, как можно объяснить устойчивость боровских орбит, исходя из гипотезы о волновых свойствах частиц (см. ниже).

1.8. Атом Резерфорда – Бора

Эрнест Резерфорд [11] в опытах по рассеянию α -частиц на металлических фольгах (1911) обнаружил, что атом состоит из тяжелого положительно заряженного ядра (в котором сосредоточена практически вся масса атома) очень малого размера (для золота, например, $\sim 6 \cdot 10^{-13}$ см), окруженного легкими отрицательными электронами, и предложил планетарную модель атома, согласно которой электроны двигаются вокруг ядра на огромных, по сравнению с размерами самого ядра, расстояниях порядка 10^{-8} см, подобно планетам вокруг Солнца.

Однако атом в такой классической модели является совершенно неустойчивым, поскольку ускоренно движущийся по окружности электрон, согласно классической электродинамике, должен непрерывно излучать электромагнитные волны и терять энергию. Тем не менее атомы существуют. Поэтому Нильс Бор (1913) предположил наличие некоторых *стационарных* круговых орбит электрона вокруг ядра в атоме с энергиями, принимающими лишь дискретные значения $E_1, E_2, \dots$, причем в основном состоянии с низшей энергией атом не излучает [12].

Излучение же происходит при переходе из возбужденных верхних в более низкие состояния атома. Значения же энергий этих состояний (в простейшем случае водородоподобного атома с одним электроном на круговой орбите) определяются из условия, что электрон в кулоновском поле ядра может двигаться лишь по таким орбитам, для которых момент количества движения является кратным $\hbar$, т. е. $L_n = m v_n r_n = n \hbar$, где m – масса электрона; e – его заряд; v_n – скорость на n -й орбите с радиусом r_n . Заметим, что во все формулы, описывающие обсуждавшиеся выше явления: и «черное» излучение, и фотоэффект, и комптоновское рассеяние, и строение атома, входит одна и та же константа $\hbar$, что является весьма нетривиальным фактом, свидетельствующим о том, что константа $\hbar$ – фундаментальна. Ее величина, как мы увидим далее, характеризует степень «квантовости» явлений в разных условиях.

Правило квантования Бора для круговых орбит электронов в атоме водорода (или водородоподобном атоме с одним электроном) было позже обобщено Зоммерфельдом и на эллиптические орбиты. Из правила Бора следует дискретность уровней энергии атома.

Действительно, при движении электрона вокруг ядра с зарядом Ze по круговой орбите центростремительная сила равна кулоновской:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}, \quad (1.28)$$

где v – скорость электрона; r – расстояние от электрона до ядра. Так что

$$mvr = \frac{Ze^2}{v} = n\hbar, \quad (1.29)$$

откуда сразу следует спектр скоростей электрона на орбитах

$$v_n = \frac{Ze^2}{n\hbar} = Z\alpha \frac{c}{n}, \quad (1.30)$$

где $\alpha = e^2 / \hbar c \approx 1/137$ – так называемая *постоянная тонкой структуры*; c – как всегда, скорость света. Радиусы этих стационарных орбит определяются из формулы (1.29) при учете равенства (1.30):

$$r_n = \frac{n\hbar}{mv_n} = \frac{(n\hbar)^2}{mZe^2} = \frac{n^2 \tilde{\lambda}_{ce}}{Z\alpha}. \quad (1.31)$$

Здесь $\tilde{\lambda}_{ce}$ – уже знакомая нам приведенная комптоновская длина волны электрона (далее слово «приведенная» будем опускать). Как видим, скорость электрона вокруг ядра и радиус его орбиты очень просто связаны со скоростью света и комптоновской длиной волны.

Полная энергия электрона в атоме равна сумме потенциальной и кинетической энергий:

$$E_n = \frac{mv_n^2}{2} - \frac{Ze^2}{r_n} = \frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} - \frac{mZ^2e^4}{n^2\hbar^2} = -\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} = -\frac{\alpha^2 Z^2}{2n^2} mc^2. \quad (1.32)$$

Для атома водорода, например,

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2n^2} mc^2 = -\frac{1}{2n^2} \frac{0,511 \cdot 10^6 [\text{эВ}]}{137^2} \approx -\frac{13,6 [\text{эВ}]}{n^2} \quad (n = 1, 2, \dots, \infty), \quad (1.33)$$

т. е. энергия связи электрона в низшем состоянии ($n = 1$) равна 13,6 эВ. *Энергией связи атома*, или *энергией ионизации* называется работа, которую необходимо совершить для удаления электрона из атома.

Испускание света происходит при переходе электрона из возбужденного состояния с энергией E_n в состояние с более низкой энергией E_k . Частота излучаемого света определяется соотношением Бора

$$\omega_{nl} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}. \quad (1.34)$$

Это же соотношение определяет частоту поглощаемого света, при этом электрон в атоме переходит с нижнего уровня E_k на более высокий уровень E_n .

Радиус электронной орбиты в атоме водорода в состоянии с энергией E_n называется *n-м боровским радиусом*. Радиус основного состояния атома водорода (с энергией E_1) называется *первым боровским*, или просто *боровским радиусом*. Его величина равна

$$r_B = \tilde{\lambda}_{ce} / \alpha = 137 \cdot 3,86 \cdot 10^{-11} = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0,53 \text{ \AA}. \quad (1.35)$$

Формула Бора (1.34) объясняет линейчатые спектры излучения и поглощения атомов, а также замечательно описывает все наблюдаемые серии оптических линий в спектрах атома водорода, такие как, например, хорошо известная еще с

1885 г. серия И. Бальмера. И это прекрасное согласие боровской теории атома водорода с экспериментом служило веским аргументом в пользу ее справедливости. Однако попытки применить эту теорию к более сложным атомам не увенчались успехом; кроме того, Бор не смог дать физической интерпретации своим правилам (постулатам Бора). Ответ дала квантовая механика, и в первую очередь гипотеза де Бройля о том, что частицы могут проявлять волновые свойства.

1.9. Опыты Франка и Герца

Еще одно прямое доказательство прерывности (дискретности) энергий атомных состояний было получено в 1914 г. в опытах Джеймса Франка и Густава Герца (племянника известного Генриха Герца) по рассеянию электронов на атомах (Нобелевская премия, 1925 г.) [13]. Через пары ртути пропускался поток электронов, т. е. электрический ток. Оказалось, что протекающий ток в зависимости от энергии электронов имеет максимумы и минимумы (рис. 1.4). Пока энергия электронов не превосходит 4,9 эВ, электроны проходят через пары ртути, не теряя энергии (ток определяется скоростью электронов), поэтому ток растет с ростом напряжения. При энергии в 4,9 эВ ток падает, поскольку электроны начинают терять энергию при столкновениях с атомами ртути, изменяя внутреннюю энергию последних.

В следующей работе они это доказали наблюдением ультрафиолетового излучения возбужденных атомов ртути с длиной волны примерно 254 нм, которая как раз и соответствует переходу с энергией 4,9 эВ, что вполне согласуется с теорией Бора.

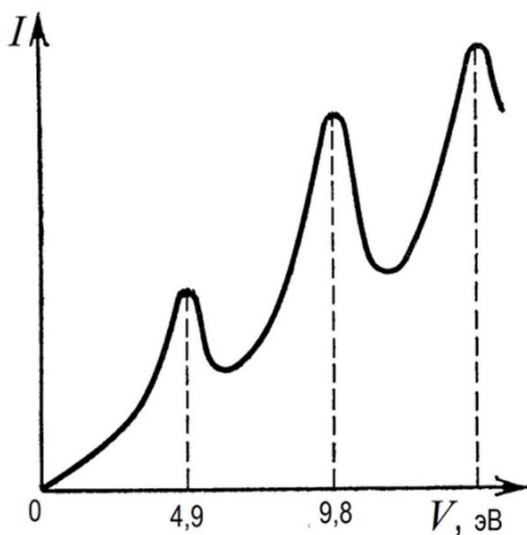


Рис. 1.4. Зависимости электрического тока, проходящего через пары ртути, от энергии электронов

Кроме того, в 1922 г. Отто Штерну и Вальтеру Герлаху в работе «Магнитный момент атома серебра» [14] удалось экспериментально доказать справедливость гипотезы Бора о том, что момент количества движения атомов может принимать только некоторые дискретные значения.

1.10. Гипотеза де Бройля. Волновые свойства частиц

Как мы отметили, попытки применить теорию Бора – Зоммерфельда к более сложным, чем водород, атомам не увенчались успехом; кроме того, Бору не удалось разработать какой-либо физической интерпретации своим постулатам.

Предположенные же Луи де Бройлем [9] волновые свойства частиц позволили естественным образом объяснить казавшиеся весьма искусственными правила квантования классических орбит электрона в атоме. Они следуют из гипотезы де Бройля, если предположить, что каждая орбита образуется волной, идущей по окружности вокруг ядра атома. Стационарная орбита возникает только тогда, когда волна непрерывно повторяет себя после каждого оборота вокруг ядра (рис. 1.5).

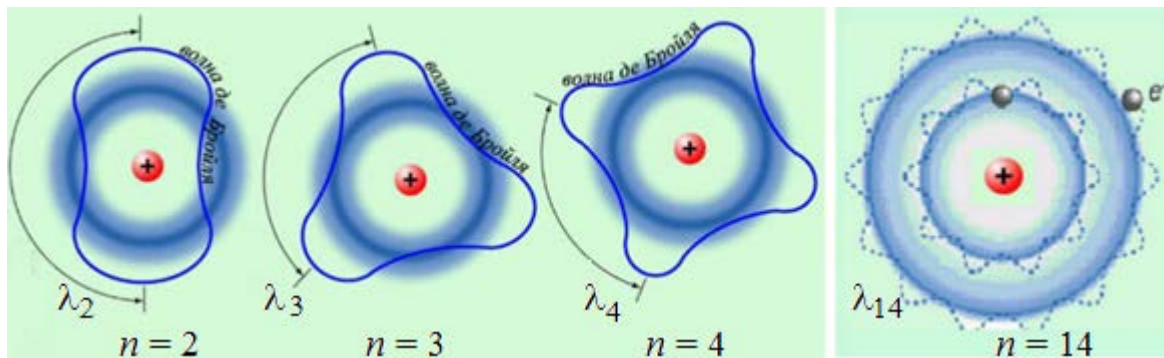


Рис. 1.5. Возникновение стоячих электронных волн на орбитах

В противном случае после первого оборота максимум пришедшей волны не совпадет с максимумом предыдущей, и через несколько оборотов волна придет уже в противофазе к первоначальной и ее уничтожит (деструктивная интерференция). Стационарная волна возможна, только когда на длине орбиты укладывается целое число длин волн, а это и есть правило квантования Бора.

Действительно, из равенства

$$2\pi r_n = n\lambda_n = \frac{2\pi n\hbar}{mv_n} \quad (1.36)$$

следует правило квантования Бора (дискретность момента импульса): $mv_n r_n = n\hbar$. Поскольку размер атома порядка 10^{-8} см, то и длины волн электрона в атоме должны иметь такой же порядок.

Оценим возможные значения длины волн де Бройля в реальных условиях. Пусть электроны разгоняются в вакуумной трубке и проходят разность потенциалов U . Ограничимся нерелятивистским случаем. Тогда кинетическая энергия электрона равна $E_k = eU = p^2/2m \ll mc^2$, а импульс $p = (2meU)^{1/2}$. Дебройлевская длина волны такого электрона равна

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}} \equiv \frac{2\pi\hbar mc}{mc\sqrt{2meU}} = \lambda_c \sqrt{\frac{mc^2}{2eU}} \gg \lambda_c. \quad (1.37)$$

Энергия покоя (масса) электрона $m_e c^2 = 0,511 \text{ МэВ} = 0,511 \cdot 10^6 \text{ эВ}$, протона – $m_p c^2 = 0,938 \text{ ГэВ} = 0,938 \cdot 10^9 \text{ эВ}$, так что их комптоновские длины волн

$$\lambda_{ce} = 2,426 \cdot 10^{-10} \text{ см}, \quad \lambda_{cp} = 1,321 \cdot 10^{-13} \text{ см},$$

соответственно, приведенные длины –

$$\tilde{\lambda}_{ce} = \lambda_{ce} / 2\pi = 3,86 \cdot 10^{-11} \text{ см}, \quad \tilde{\lambda}_{cp} = 2,1 \cdot 10^{-14} \text{ см}.$$

Если длину волны электрона измерять в ангстремах ($\text{\AA}$), а разность потенциалов – в вольтах (В), т. е. кинетическую энергию в электронвольтах (эВ), то, используя значения $\hbar = 6,6 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{с}$ и $c = 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}$ для электронов, протонов и нейтронов, будем иметь следующую связь между их энергиями и длинами волн:

$$\lambda_e \approx \frac{12,3}{\sqrt{U [\text{В}]}} [\text{\AA}], \quad \lambda_{p,n} \approx \frac{0,3}{\sqrt{E_k [\text{эВ}]}} [\text{\AA}]. \quad (1.38)$$

Здесь мы пренебрегли малой, по сравнению с самими массами, разницей масс протона и нейтрона ($m_n c^2 - m_p c^2 \approx 1,3 \text{ МэВ}$).

Таким образом, если электрон прошел разность потенциалов $U = 10 \text{ В}$, то $\lambda = 3,9 \text{ \AA}$. Если $U = 100 \text{ В}$, то $\lambda = 1,2 \text{ \AA}$, а если $U = 1000 \text{ В}$, то $\lambda = 0,4 \text{ \AA}$. То есть при таких условиях длины волн электронов примерно такие же, как для рентгеновского излучения, и одного порядка с межатомными расстояниями в веществе. Поэтому эксперименты по дифракции таких электронов можно ставить так же, как для рентгеновских лучей, и использовать в качестве дифракционной решетки кристалл.

Для нейтронов же в силу их большой массы длина волны $\lambda = 1 \text{ \AA}$ достигается при энергиях $E_k \approx 0,1 \text{ эВ}$. Такие нейтроны называются *тепловыми*, и их также можно использовать в дифракционных опытах на кристаллах. Для фотонов $\lambda = 1 \text{ \AA}$ достигается при энергии $E \approx 12,4 \text{ кэВ}$:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{E} = \frac{2\pi \cdot 6,6 \cdot 10^{-16} \cdot 3 \cdot 10^{10}}{E} = \frac{1,24 \cdot 10^{-4} [\text{см}]}{E [\text{эВ}]} = \frac{12,4 [\text{\AA}]}{E [\text{кэВ}]}. \quad (1.39)$$

Именно такие и с более высокой энергией рентгеновские лучи используются для исследований структуры вещества дифракционными методами.

Заметим, что их разрушающее действие на вещество, в частности ионизирующая способность, заметно выше, чем у нейтронов. Одной из причин является то, что энергия рентгеновских квантов (и, соответственно, переданная энергия атомам вещества при рассеянии) на пять порядков превосходит энергию нейтронов при той же длине волны. Это обстоятельство является весьма существенным при исследовании биологических объектов, например живых клеток.

Длину волны де Бройля для любой частицы с массой покоя m_0 и скоростью v можно выразить через комптоновскую длину этой частицы, ее безразмерную скорость – в единицах скорости света $\beta = v/c$ и полную энергию $E = mc^2$ (релятивистскую массу) – в единицах массы покоя $\gamma = mc^2/m_0 c^2 = (1 - \beta^2)^{-1/2}$.

Действительно, запишем выражение $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$ в виде

$$(mc^2)^2 = m^2 v^2 c^2 + (m_0 c^2)^2, \quad (1.40)$$

где введена полная масса частицы m , так что ее энергия равна $E = mc^2$, а импульс $p = mv$, тогда

$$m^2 = m^2 \frac{v^2}{c^2} + m_0^2 \quad (1.41)$$

и

$$\gamma \equiv \frac{E}{m_0 c^2} = \frac{m}{m_0} = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (1.42)$$

Таким образом,

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{2\pi\hbar}{m_0 \gamma \beta c} = \lambda_c \frac{1}{\gamma \beta} = \lambda_c \frac{\sqrt{1 - \beta^2}}{\beta}. \quad (1.43)$$

При малых скоростях $\beta \rightarrow 0$ (в нерелятивистском пределе) имеем

$$\lambda = \lambda_c / \beta, \quad (1.44)$$

т. е. дебройлевская длина волны λ больше комптоновской λ_c . Соответственно, при больших скоростях (в релятивистском случае $\beta \approx 1$) получим

$$\lambda = \lambda_c / \gamma, \quad (1.45)$$

т. е., наоборот, дебройлевская длина волны меньше комптоновской. Они совпадают, т. е. $\lambda = \lambda_c$ при $\beta^2 = 1/2$.

Волновые свойства частиц впервые непосредственно были обнаружены в экспериментах Клинтона Дэвиссона и Лестера Джермера (1927) [15], Джорджа П. Томсона (1928) [16] и Петра Саввича Тартаковского (1928) [17], в которых наблюдалась дифракция электронов при их отражении от монокристалла [15] и прохождении через тонкие поликристаллические металлические фольги [16, 17]. За эти работы Дэвиссон и Томсон были удостоены в 1937 г. Нобелевской премии.

Дополнительная литература

1. Матвеев А. Н. Атомная физика. М.: Высш. шк., 1989. 439 с.
2. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры / пер. с нем. М.: Гос. изд-во технико-теоретической лит., 1956. В 2 т.
3. Шпольский Э. В. Атомная физика. М.: Наука, 1974. В 2 т.
4. Вихман Э. Квантовая физика. Берклевский курс физики. Т. 4 / пер. с англ. М.: Наука, 1974.

Глава 2. Основные понятия квантовой механики.

Уравнение Шредингера

Перечисленные волновые свойства частиц и корпускулярные свойства электромагнитных волн позволили объяснить на единой основе довольно широкий круг явлений и предсказать новые, еще неизвестные.

Вместе с тем сочетание свойств волны и частицы в одном объекте в рамках классической физики представлялось невозможным. Правила квантования Бора – Зоммерфельда также непоследовательны. Для их формулировки использовались понятия классической механики (орбита электрона), хотя сама идея квантования чужда классической физике. Указанные трудности и противоречия удалось преодолеть Вернеру Гейзенбергу (1925) [18], Макс Борну и Паскуалу Иордану (1925) [19], создавшим матричную квантовую механику, и Эрвину Шредингеру (1926) [20], который описал квантовые явления при помощи аппарата волновой механики, оперирующего с непрерывными величинами и оказавшегося особенно эффективным для решения конкретных задач. В начале мая 1926 г. Шредингер опубликовал статью [21], в которой была показана математическая идентичность матричной и волновой механики.

После данной работы Шредингера стало ясно, что имеется единая теория, квантовая механика, и что матричная и волновая механика представляют лишь разные формы этой единой теории.

Мы попытаемся последовательно изложить результаты этих работ, не следуя им буквально, начиная с простейшего случая одной частицы, затем постепенно будем усложнять задачу.

2.1. Волна де Бройля свободной частицы. Уравнение Шредингера

Начнем с описания движения свободной частицы, а затем обобщим на случай присутствия силового поля. Попытаемся написать линейное дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет волна де Бройля.

Следуя де Бройлю, сопоставим свободной частице с импульсом $\mathbf{p}$ и энергией E плоскую волну с частотой $\omega = E/\hbar$ и волновым вектором $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ (волну де Бройля), описываемую функцией

$$\psi = Ae^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} = Ae^{-i\left(\frac{Et}{\hbar} - \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right)}, \quad (2.1)$$

причем де Бройль полагал, что энергия и импульс связаны релятивистским соотношением $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$. В этом случае фаза – релятивистский инвариант:

$$\phi = (Et - \mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar = (p_0 x_0 - p_i x_i)/\hbar = (p_\mu x_\mu)/\hbar, \quad p_0 = E/c, x_0 = ct. \quad (2.2)$$

Поверхность постоянной фазы такой волны есть плоскость, перпендикулярная $\mathbf{p}$.

Какому же уравнению удовлетворяет волна (2.1)? На этот вопрос стал искать ответ Шредингер. Он тоже сначала исходил из релятивистского соотношения, но опубликовал нерелятивистский вариант, когда $v \ll c$ или $p \ll m_0 c$, т. е.

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2}} = m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0}. \quad (2.3)$$

Опуская $m_0 c^2$ (начало отсчета энергии, далее увидим, что это несущественно), имеем $E = p^2 / 2m_0$.

Тогда в нерелятивистском приближении волна де Бройля будет удовлетворять следующему линейному дифференциальному уравнению:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi, \quad (2.4)$$

где $\nabla \equiv \text{grad}$ – векторный дифференциальный оператор набла (или градиент), действующий на функцию, с компонентами

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (2.5a)$$

а $\Delta = \nabla^2$ – скалярный оператор Лапласа

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.5b)$$

Действительно, подставляя в уравнение (2.4) выражение (2.1) для ψ , получим слева

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E \psi,$$

справа

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} \psi.$$

Приравнивая левую часть правой, имеем правильное уравнение дисперсии, т. е. соотношение между энергией и импульсом $E = \mathbf{p}^2 / 2m_0$.

Но волновая функция де Бройля (2.1) лишь частное решение уравнения (2.4). Постулируем, что такая волна описывает состояние свободного движения частицы с *определенными* энергией и импульсом.

Обратим внимание, что приведенные выше соображения для написания уравнения (2.4), которое и есть *уравнение Шредингера* для свободной нерелятивистской частицы, ни в коей мере не являются выводом этого уравнения. На самом же деле Шредингер открыл новый закон природы, выражаемый этим уравнением. Как и любой другой закон, например закон Ньютона, он ниоткуда не следует и не вытекает. Процессы, происходящие в природе, подчиняются ему, что подтверждается всей совокупностью экспериментов и наблюдений. Именно всей совокупностью, ибо даже один случай, противоречащий закону, отвергает этот закон. Конечно, есть пределы применимости законов: когда один теряет

силу, вступает в действие другой закон. Например, закон Ньютона справедлив при скоростях, много меньших скорости света, при больших скоростях вступают в силу релятивистские законы, открытые Эйнштейном. Законы же Ньютона есть просто предельный случай более общих законов, и они с достаточной точностью описывают процессы в своей области применимости.

Точно так же и квантовые нерелятивистские законы должны вытекать из соответствующих релятивистских законов и переходить в классические при определенных условиях, которые мы обсудим далее.

Таким образом, теперь исходим из уравнения Шредингера и попробуем выяснить и интерпретировать свойства его решений.

2.2. Принцип суперпозиции состояний

Будем считать, что любое решение уравнения (2.4) описывает некоторое состояние свободной частицы, и называть его *волновой функцией*.

Одним из основных и важнейших положений квантовой механики является принцип суперпозиции состояний. В простейшей форме он сводится к двум утверждениям.

1. Если какая-либо система может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями ψ_1 и ψ_2 , то она может находиться и в состояниях, которые описываются линейной комбинацией (суперпозицией) этих функций, т. е.

$$\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2, \quad (2.6)$$

где a_1 и a_2 – любые комплексные числа, не зависящие от времени.

2. Если волновую функцию умножить на любое неравное нулю комплексное число, то новая функция будет описывать то же состояние системы.

В нашем случае принцип суперпозиции выполняется в силу линейности уравнения Шредингера для свободной частицы. С другой стороны, он требует линейности уравнения и в общем случае, т. е. накладывает ограничения на взаимодействие.

Принцип суперпозиции состояний отражает очень важное свойство квантовых систем, не имеющее аналога в классической физике. Действительно, рассмотрим состояние, которое изображается волновой функцией

$$\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 = a_1e^{-i(\omega_1t - \mathbf{k}_1\mathbf{r})} + a_2e^{-i(\omega_2t - \mathbf{k}_2\mathbf{r})}. \quad (2.7)$$

В состояниях ψ_1 и ψ_2 у частицы определенные (но разные) импульсы $\mathbf{p}_1 = \hbar\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{p}_2 = \hbar\mathbf{k}_2$ соответственно. В состоянии же (2.7) движение частицы не характеризуется определенным значением импульса, так как его нельзя изобразить плоской волной с одним значением волнового вектора. «Вес» состояний ψ_1 и ψ_2 в данной суперпозиции, как мы увидим далее, пропорционален квадратам модулей коэффициентов a_1 и a_2 .

Таким образом, квантовая механика допускает состояния, в которых некоторые физические величины не имеют определенных значений.

2.3. Волновой пакет. Фазовая и групповая скорости

Рассмотрим теперь состояние свободного движения, которое характеризуется волновой функцией, представленной волновым пакетом следующего вида:

$$\psi(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kz - \omega t)} dk = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{i(kz - \omega t)} dk, \quad (2.8)$$

т. е. в виде суперпозиции плоских волн, волновые векторы которых направлены по оси z и имеют значения, лежащие в интервале $k_0 - \Delta k \leq k \leq k_0 + \Delta k$.

Таким образом, функция $A(k)$, характеризующая распределение волновых векторов (импульсов) в этой суперпозиции (пакете волн), имеет прямоугольную форму (рис. 2.1):

$$A(k) = \begin{cases} 1 & k_0 - \Delta k \leq k \leq k_0 + \Delta k, \\ 0 & k_0 + \Delta k \leq k \leq k_0 - \Delta k. \end{cases} \quad (2.9)$$

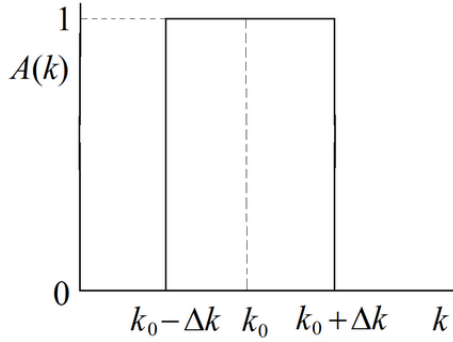


Рис. 2.1. Распределение в волновом пакете амплитуд плоских волн по волновым векторам k шириной $2\Delta k$

2.3.1. Фазовая скорость

Функция, описывающая плоскую волну, которая распространяется вдоль оси z , с волновым вектором $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = (0, 0, k)$, направленным по оси z , имеет вид

$$e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} = e^{i(kz - \omega t)}. \quad (2.10)$$

Она имеет постоянное значение (например, на гребне волны или во впадине) на поверхности постоянной фазы:

$$\phi = \mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t = kz - \omega t = \text{const}, \quad (2.11)$$

которая представляет собой плоскость, перпендикулярную вектору $\mathbf{k}$ (оси z) и движущуюся в направлении $\mathbf{k}$ (вправо по оси z , т. е. в сторону увеличения z).

Действительно, из формулы (2.11) следует

$$z = \frac{\omega}{k}t + \frac{\text{const}}{k}. \quad (2.12)$$

Скорость движения этой поверхности – фазовая скорость – равна

$$v_{\phi} = \frac{dz}{dt} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}. \quad (2.13)$$

В общем случае связь между энергией и импульсом можно записать как

$$E = mc^2 = \frac{p}{v} c^2, \quad (2.14)$$

где m – релятивистская масса, так что

$$v_{\phi} = \frac{c^2}{v} > c. \quad (2.15)$$

Фазовая скорость массивной частицы всегда больше скорости света, причем стремится к бесконечности при $k \rightarrow 0$. Это свойство релятивистских частиц связано с конечностью массы покоя. Действительно, при $k \rightarrow 0$ волновая функция (2.10) во всех точках пространства будет испытывать колебания во времени с практически одинаковой фазой $\omega_0 t \sim m_0 c^2 t / \hbar$ (m_0 – масса покоя), это и означает бесконечную скорость распространения фазы. Изменение фазы за малое время Δt , например в точке $z = 0$, равное $\omega_0 \Delta t$, компенсируется лишь на очень большом расстоянии $z = (\omega_0/k) \Delta t$, что и отвечает почти мгновенному (при $k \rightarrow 0$) перемещению поверхности постоянной фазы на большое расстояние.

2.3.2. Групповая скорость

Вернемся к нашему волновому пакету:

$$\psi(z, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{i[kz - \omega(k)]t} dk. \quad (2.16)$$

Введем новую величину $\kappa = k - k_0$, т. е. волновой вектор, отсчитываемый от центра распределения, изображенного на рис. 2.1, и изменяющийся в пределах от $-\Delta k$ до $+\Delta k$. Раскладывая в ряд по κ величину $\omega(k)$ вблизи k_0 и ограничиваясь первым членом разложения, получаем

$$\omega(k) = \omega(k_0 + \kappa) = \omega(k_0) + \kappa \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0}. \quad (2.17)$$

Тогда

$$\begin{aligned}\psi(z, t) &= e^{i[k_0 z - \omega(k_0)t]} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i\kappa \left(z - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t \right)} d\kappa = \\ &= \frac{2 \sin \left\{ \left[z - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t \right] \Delta k \right\}}{\left(z - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t \right)} e^{i[k_0 z - \omega(k_0)t]} \equiv A(z, t) e^{i[k_0 z - \omega(k_0)t]}.\end{aligned}\quad (2.18)$$

Таким образом, мы получили плоскую волну с зависящей от z и t амплитудой $A(z, t)$, изображенной на рис. 2.2, причем максимум этой амплитуды достигается при

$$\left(z - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t \right) \Rightarrow 0 \quad (2.19)$$

или при

$$z = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t, \quad (2.20)$$

т. е. координата максимума движется так же, как и фазовая поверхность: вправо, но с другой скоростью, которая называется *групповой* и равна

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} = \left(\frac{dE}{dp} \right)_{p_0}. \quad (2.21)$$

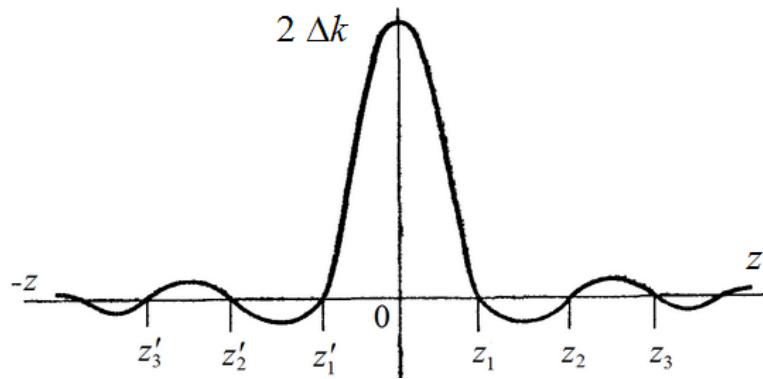


Рис. 2.2. Вид амплитуды $A(z, t)$ в момент $t = 0$. Ее максимум достигается при $z = 0$ и равен $2\Delta k$. С течением времени средняя точка волнового пакета, соответствующая максимуму амплитуды, перемещается в пространстве с групповой скоростью

Вспоминая, что в нерелятивистском случае

$$E = mc^2 + \frac{p^2}{2m},$$

получаем

$$v_g = \left(\frac{dE}{dp} \right)_0 = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar k_0}{m} = v, \quad (2.22)$$

т. е. групповая скорость волнового пакета совпадает со скоростью частицы.

2.4. Соотношение неопределенностей

Амплитуда изображенного на рис. 2.1 пакета в момент $t = 0$ в точках $z = z_n = \pi n / \Delta k$ ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$) обращается в нуль. Значение $\Delta z = 2z_1 = 2\pi / \Delta k$ можно рассматривать как пространственную протяженность волнового пакета. Причем реальная протяженность даже превосходит $2\pi / \Delta k$, поскольку пакет (хотя и с малой амплитудой) продолжается и за пределами z_1 и $z_{-1} = z'_1$ (см. рис. 2.2). Чем меньше Δk (разброс значений импульсов), т. е. чем точнее определен импульс в пакете, тем больше его пространственная протяженность (разброс в пространстве). Учитывая, что $\Delta k = \Delta p / \hbar$, из $\Delta z \Delta k \geq 2\pi$ получаем

$$\Delta z \Delta p \geq 2\pi \hbar. \quad (2.23)$$

Точно так же из-за разброса по k у частицы имеется разброс по частотам (энергиям), определяемый как

$$\Delta \omega = \left(\frac{d\omega}{dk} \right) \Delta k, \quad (2.24)$$

поэтому при фиксированном значении z , например при $z = 0$, пакет будет так же ограничен и во времени в области $\Delta t \geq 2\pi / \Delta \omega$, т. е.

$$\Delta t \Delta E \geq 2\pi \hbar. \quad (2.25)$$

Итак, распределение импульсов с разбросом по k_z , равным $2\Delta k$, приводит к распределению координат с разбросом $\Delta z = 2z_1 = 2\pi / \Delta k = 2\pi \hbar / \Delta p$ (рис. 2.3).

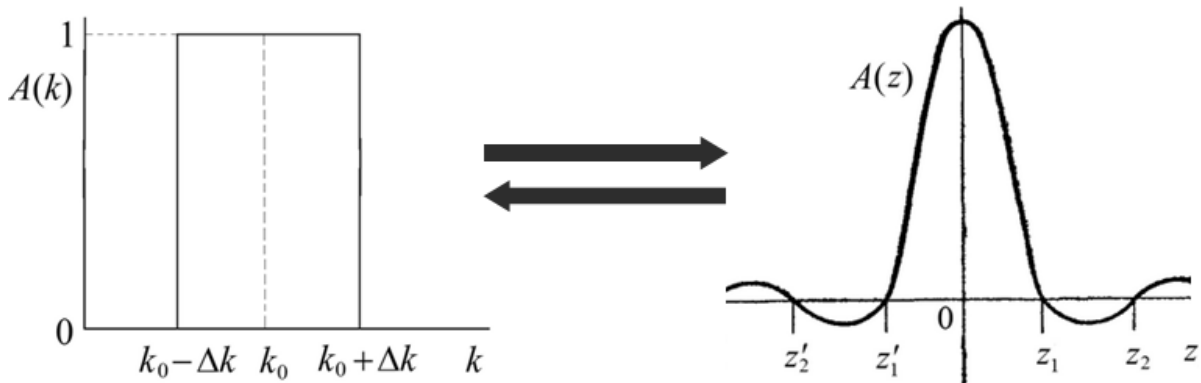


Рис. 2.3. Разбросу по импульсам отвечает разброс по координатам и наоборот

С другой стороны, это означает, что если мы имеем пакет пространственной протяженности Δz , то частица должна иметь разброс соответствующих компонент импульсов $\Delta p_z = 2\pi\hbar/\Delta z$. Причем чем точнее определена координата частицы, тем менее определенным становится ее импульс, и, наоборот, чем точнее координата, тем неопределеннее импульс. Этот принцип неопределенности, открытый Вернером Гейзенбергом в 1927 г. [22], является одним из краеугольных камней квантовой механики и выражается соотношениями неопределенности (2.23, 2.25). Далее мы дадим более точную формулировку этого принципа.

Таким образом, если распределение $A(k)$ импульсов, изображенное на рис. 2.3 *слева*, соответствует распределению координат $A(z)$, изображенному *справа*, то прямоугольное распределение координат приведет к распределению импульсов, аналогичному изображенному *справа* (в дальнейшем мы это покажем более строго).

2.4.1. Дифракция на щели

Такая ситуация (с прямоугольным распределением по координате z частицы) реализуется, если мы ограничим плоскую волну, идущую в направлении x с импульсом p_0 , щелью в направлении z шириной Δz . В результате мы получим распределение компонент импульсов частицы p_z вблизи нулевого значения с шириной, равной $\Delta p_z = 2\pi\hbar/\Delta z$, как изображено на рис. 2.4.

Наличие компоненты импульса по оси z означает отклонение направления движения частицы от первоначального. В результате на экране (*справа* от щели) будут наблюдаться светлые и темные (в местах, куда попадают электроны) полосы – дифракционная картина, характерная для волн.

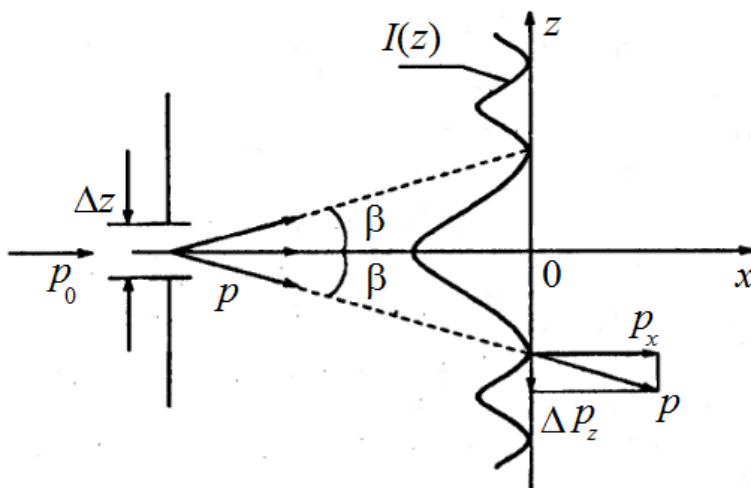


Рис. 2.4. Иллюстрация дифракции на щели

Угол β отклонения от первоначального направления движения частицы определяется величиной $\tan \beta = \Delta p_z / p_0$, так что угол, отвечающий ширине распределения по импульсам, определится из

$$\tan \beta = \frac{\Delta p_z}{p_0} \approx \frac{2\pi\hbar}{p_0 \Delta z} = \frac{\lambda}{\Delta z}. \quad (2.26)$$

Из этого выражения следует, что заметным отклонение движения частицы от прямолинейного (а это и есть дифракция) будет лишь тогда, когда ширина щели сравнима с длиной волны. Таким образом, для электронов даже сравнительно малых энергий, например $E = 100$ эВ, длина волны $\lambda = 1,2$ Å – уже порядка межатомных расстояний в веществе, т. е. чтобы наблюдать волновые свойства такого электрона, нужны щели данного размера. Такие щели имеются только в кристаллах, на которых и наблюдалась дифракция электронов.

Заметим, что из формулы (2.26) следует, что переход к классическому пределу, когда $\tan \beta = 0$, осуществляется при $\hbar \rightarrow 0$ (в этом случае и $\lambda \rightarrow 0$).

2.5. Свойства волновой функции и ее фурье-образа

Рассмотрим наиболее общую суперпозицию волн де Бройля:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \varphi(\mathbf{p}) e^{i\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)} d^3 p, \quad (2.27)$$

где $\varphi(\mathbf{p})$ – функция, для которой интеграл

$$\int |\varphi(\mathbf{p})|^2 d^3 p$$

конечен, в остальном она произвольна. Функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ также удовлетворяет уравнению Шредингера и описывает свободную частицу, не обладающую определенным импульсом (волновой пакет). Исследуем математические свойства этой волновой функции, на которые опирается ее физическая интерпретация.

Положим

$$\varphi(\mathbf{p}) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = \Phi(\mathbf{p}, t), \quad (2.28)$$

тогда формула (2.27) перепишется как

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \Phi(\mathbf{p}, t) e^{i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} d^3 p. \quad (2.29)$$

Это выражение не что иное, как разложение функции в интеграл Фурье.

Его обращение (фурье-образ функции $\psi(\mathbf{r}, t)$) имеет вид

$$\Phi(\mathbf{p}, t) = \int \psi(\mathbf{r}, t) e^{-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} d^3 r. \quad (2.30)$$

Для доказательства формулы (2.30) умножим обе части предыдущего выражения (2.28) на $\exp(-i\mathbf{p}'\mathbf{r}/\hbar)$ и проинтегрируем по $d^3 r$:

$$\int e^{-i\frac{\mathbf{p}'\mathbf{r}}{\hbar}} \psi(\mathbf{r}, t) d^3 r = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \Phi(\mathbf{p}, t) e^{i\frac{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}}{\hbar}} d^3 k d^3 r = \Phi(\mathbf{p}', t). \quad (2.31)$$

В результате получилось выражение (2.30) для фурье-образа $\Phi(\mathbf{p}, t)$. Здесь мы использовали выражение

$$\int e^{i\frac{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}}{\hbar}} d^3r = \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d^3r = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'), \quad (2.32)$$

которое определяет δ -функцию Дирака $\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$.

2.5.1. Отступление о δ -функции

Рассмотрим функцию

$$\int_{-z_0}^{+z_0} e^{ik_z z} dz = \frac{2 \sin k_z z_0}{k_z} \xrightarrow{z_0 \rightarrow \infty} 2\pi \delta(k_z). \quad (2.33)$$

Она как раз и характеризует распределение импульсов в прямоугольном пакете, т. е. дифракцию от щели шириной $\Delta z = 2z_0$, которая изображена на рис. 2.4. При больших z_0 эта функция имеет резкий максимум при $k_z = 0$, равный $2z_0$, и обращается в нуль при $k_z = \pm n\pi/z_0$ (n – любое целое число), т. е. его ширина равна $2\pi/z_0$ (как показано на рис. 2.5). При $z_0 \rightarrow \infty$ функция (2.33) становится бесконечно узкой и бесконечно высокой, площадь S под ней при этом сохраняется и равна 2π . Поделив функцию (2.33) на 2π , получим δ -функцию. Она отлична от нуля только в одной точке и имеет единичную площадь, поэтому для любой функции $f(k)$ можно написать

$$f(k) = \int f(k') \delta(k-k') dk'. \quad (2.34)$$

Это главное свойство δ -функции; оно означает, что любую функцию можно представить в виде суперпозиции δ -функций.

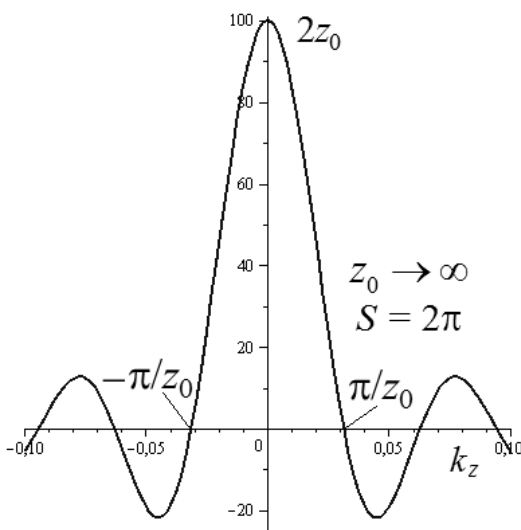


Рис. 2.5. Функция $2 \sin k_z z_0 / k_z$ имеет резкий максимум при $k_z = 0$ шириной $2\pi/z_0$ и высотой $2z_0$, площадь под кривой $S = 2\pi$. При $z_0 \rightarrow \infty$ это очевидно, поскольку кривую можно аппроксимировать узким треугольником с основанием $2\pi/z_0$ и высотой $2z_0$, интегрирование дает тот же результат

Точно так же имеют место равенства

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_x x} dx = 2\pi\delta(k_x) \quad \text{и} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_y y} dy = 2\pi\delta(k_y). \quad (2.35)$$

Перемножая все выражения (2.33, 2.35), будем иметь

$$\int e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} dx dy dz = (2\pi)^3 \delta(k_x) \delta(k_y) \delta(k_z)$$

или

$$\int e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3r = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}). \quad (2.36)$$

Это и есть выражение для трехмерной δ -функции (2.32).

2.6. Нормировочные интегралы. Уравнение неразрывности

Очень важным свойством волновой функции и ее фурье-образа является *равенство интегралов*, которые мы назовем нормировочными:

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = \int |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (2.37)$$

Это доказывается достаточно просто. Действительно,

$$\begin{aligned} \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r &= \int d^3r \int \Phi(\mathbf{p}, t) e^{i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int \Phi^*(\mathbf{p}', t) e^{-i\frac{\mathbf{p}'\mathbf{r}}{\hbar}} \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= \int \Phi(\mathbf{p}, t) \Phi^*(\mathbf{p}', t) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} = \int |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Другим важным свойством является *независимость их от времени*. Это следует из уравнения Шредингера. Напишем его:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi. \quad (2.39)$$

Напишем также комплексно-сопряженное уравнение:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*. \quad (2.40)$$

Умножая первое уравнение (2.39) слева на ψ^* , а комплексно-сопряженное (2.40) – на ψ и вычитая из первого второе, находим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \frac{\hbar^2}{2m} (\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi). \quad (2.41)$$

Введем новые величины:

$$\rho = \psi^* \psi, \quad \mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im } \psi^* \nabla \psi, \quad (2.42)$$

тогда из выражения (2.41) приходим к дифференциальному уравнению, связывающему эти величины:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0. \quad (2.43)$$

Это так называемое *уравнение неразрывности*, или *непрерывности*, являющееся основой вероятностной интерпретации квантовой механики. Обсудим его подробнее.

Проинтегрируем левую и правую части этого равенства по объему, ограниченному замкнутой поверхностью. Объемный интеграл от правой части по теореме Остроградского – Гаусса равен потоку вектора $\mathbf{j}$ через поверхность:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \oint_S \mathbf{j}_n dS. \quad (2.44)$$

Если принять, что величина $\rho(\mathbf{r})$ пропорциональна плотности вероятности найти частицу в точке $\mathbf{r}$ (т. е. плотности распределения частиц), а $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ – плотности тока вероятности (плотности потока частиц), то выражение (2.44) будет означать, что число частиц, убывающих из объема V в единицу времени, равно потоку частиц через поверхность, ограничивающую объем (т. е. числу частиц, пересекающих эту поверхность в единицу времени).

Действительно, рассмотрим волну де Бройля, которая описывает частицу с заданным импульсом $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$:

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)} = A e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}.$$

Для нее формулы (2.42) дают

$$\rho = \psi^* \psi = |A|^2, \quad \mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im } \psi^* \nabla \psi = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} |A|^2 = \rho \mathbf{v}. \quad (2.45)$$

Выражение для плотности тока $\mathbf{j}$ имеет простой физический смысл числа частиц, которые пересекут единичную площадку за единицу времени. Действительно, число частиц dn , пересекающих площадку dS за время dt , – это есть все частицы, находящиеся на расстоянии $< vdt$ от площадки dS (рис. 2.6), т. е. все частицы в объеме $dV = vdt dS$, а их число равно $dn = \rho vdt dS$, где ρ – плотность числа частиц, так что число частиц, пересекающих единичную площадку в единицу времени (плотность потока частиц), будет равно $j = dn/dt dS = \rho v$.

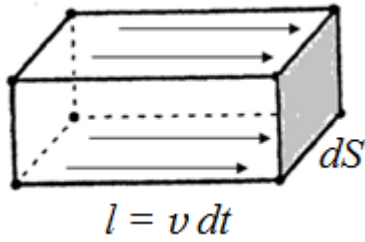


Рис. 2.6. Поток частиц $d\phi$ через площадку dS , т. е. число частиц, пересекающих эту площадку в единицу времени, по определению равен плотности потока j на величину этой площадки: $d\phi = j dS = \rho v dS$

Таким образом, уравнение (2.33) отражает тот факт, что в нерелятивистской теории имеет место закон сохранения числа частиц: частицы не рождаются и не исчезают, а изменение числа частиц в некотором объеме происходит просто за счет ухода частиц через его поверхность. Число же частиц не меняется.

Этот закон был сформулирован Михаилом Васильевичем Ломоносовым в более общем виде еще в 1748 г.: «Все встречающиеся в природе изменения происходят так, что если к чему-либо нечто прибавилось, то это отнимается у чего-то другого».

2.7. Вероятностная интерпретация волновой функции

Устремляя поверхность в равенства (2.44) к бесконечности и учитывая убывание, необходимое для обеспечения сходимости объемного интеграла от $|\psi|^2$, получим, что поверхностный интеграл обращается в нуль, т. е.

$$\int \rho dV = \int |\psi|^2 dV = \text{const.}$$

Так что можно умножить ψ на подходящий множитель (равный $\text{const}^{-1/2}$), с тем чтобы нормировать ее по условию

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1. \quad (2.46)$$

У этой нормировки имеется вполне конкретный физический смысл, уточняющий нашу вероятностную интерпретацию волновой функции: полная вероятность найти частицу во всем объеме равна единице.

В вышеприведенные формулы (2.29, 2.30) функции Φ и ψ входят симметрично и совершенно равноправно. Эта симметрия подсказывает, что трактовка ψ и Φ должна быть единообразной. Кроме того, в трактовке должно отражаться сохранение интегралов от этих функций. Этим требованиям и удовлетворяет вероятностная интерпретация волновой функции, предложенная Максом Борном в 1926 г. (еще ее называют *копенгагенской*) [23]. Именно за это Борн в 1954 г. получил Нобелевскую премию.

Предполагается, что физическая величина в некоторых условиях может не иметь определенного значения. Тогда при многократном ее измерении в одних и тех же условиях будут получаться те или иные значения, так что в серии измерений будет существовать неустранимый статистический разброс.

Количественной мерой разброса некоторой величины λ относительно ее среднего значения $\langle \lambda \rangle$ принято считать среднюю величину $\langle (\lambda - \langle \lambda \rangle)^2 \rangle$, называемую *среднеквадратичным разбросом*. Этот неустранимый разброс в квантовой механике считается первичным фактором, законом природы. Также такая трактовка подразумевает, что и волны, описывающие частицы или фотоны, представляют из себя не колебания некоторой непрерывной субстанции (из которых можно построить пакеты, т. е. сгустки, являющиеся частицами), а волны, описывающие вероятности найти точечную частицу в той или иной точке пространства. Этот случай означает, что частица не имеет определенных координат в пространстве. Частица как бы размазана в пространстве с соответствующей вероятностью (которая и определяет плотность вещества, т. е. частиц в пространстве).

Таким образом, выражение

$$dW(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r \equiv |\psi|^2 dV \equiv |\psi|^2 d\mathbf{r} \quad (2.47)$$

трактуется как вероятность того, что при измерении координаты частицы в момент t получатся значения, лежащие вблизи точки $\mathbf{r} = (x, y, z)$ в элементе объема dV , т. е. в интервалах координат $(x, x + dx)$, $(y, y + dy)$, $(z, z + dz)$. Таким образом, величина $|\psi|^2 = dW/dV$ представляет собой *плотность вероятности*.

Сама же волновая функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ есть так называемая *амплитуда вероятности* найти частицу в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t .

Интеграл $\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ представляет сумму вероятностей всех возможных значений координат, т. е. вероятность найти частицу во всем пространстве. Он по определению должен равняться единице. Это и есть условие нормировки волновой функции.

Аналогично выражение

$$dW(\mathbf{p}) = |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p / (2\pi\hbar)^3 \quad (2.48)$$

трактуется как вероятность того, что при измерении импульса будут получены значения вблизи $\mathbf{p}$ в элементе объема d^3p пространства импульсов.

Заметим, что $dW(\mathbf{p})$ у нас получилось не зависящим от t . Это особенность, свойственная только свободной частице. Величина $\Phi(\mathbf{p}, t)$ называется *волновой функцией в пространстве импульсов* (или в импульсном представлении). Она есть амплитуда вероятности частице иметь импульс $\mathbf{p}$.

2.8. Причинность в квантовой механике

Поскольку уравнение Шредингера содержит производную по времени первого порядка, это означает, что задание начального значения $\psi(\mathbf{r}, t)$ при $t = 0$ однозначно определяет ψ для всех последующих времен t , так что волновая функция развивается во времени причинным образом, хотя сама она определяет вероятность случайного события.

Наряду с таким причинным изменением волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ имеет место также ее скачкообразное изменение в результате измерения. Например, если в некоторый момент t в результате измерения получено какое-то значение координаты частицы (благодаря чему оно достоверно известно), то распределение вероятностей, характеризуемое функцией ψ , перестает существовать. Такое изменение называется *редукцией волнового пакета*. Однако редукция отнюдь не является реальным физическим процессом. Это логическая операция. Процесс измерения меняет состояние частицы.

2.9. Стационарные состояния. Операторы энергии и импульса

Рассмотрим частное решение нашего уравнения Шредингера вида

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}. \quad (2.49)$$

Тогда, подставляя равенство (2.49) в уравнение

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi, \quad (2.50)$$

получаем для волновой функции $\psi(\mathbf{r})$, зависящей только от координат, *стационарное* уравнение Шредингера (в отличие от *нестационарного* (2.50)):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}). \quad (2.51)$$

Волновая функция (2.49) описывает так называемое *стационарное состояние*, поскольку $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2$ не зависит от времени.

Стационарное уравнение (2.51) представляет собой задачу на собственные значения. Классическим примером являются задачи на определение собственных частот колеблющихся тел (струн, мембран и т. д.). В таких задачах решения уравнений подчиняются определенным граничным условиям (в отличие от начальных условий, когда задается значение функции в начальный момент времени, здесь задаются значения функции на некоторых пространственных границах). В квантовой механике роль граничных условий часто играют требования конечности, непрерывности и однозначности решений, а также условия ортогональности и нормировки волновых функций.

Решение стационарного уравнения, обладающее требуемыми свойствами, называется *собственной функцией дифференциального оператора* $-\hbar^2 \nabla^2 / 2m$, а энергия E – собственным значением этого оператора. Естественно назвать его оператором энергии, а поскольку у свободной частицы не существует другой энергии, кроме кинетической, то оператором кинетической энергии частицы $\hat{T}$:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_x^2 + \nabla_y^2 + \nabla_z^2). \quad (2.52)$$

Очевидно, что плоская волна $\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} / \hbar)$ есть собственная функция оператора $\hat{T}$, отвечающая собственному значению:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} \equiv E_x + E_y + E_z.$$

Аналогичным образом можно ввести оператор импульса частицы $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, та же плоская волна будет его собственной функцией с собственным значением $\mathbf{p}$:

$$\hat{\mathbf{p}} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} / \hbar) = -i\hbar\nabla \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} / \hbar) = \mathbf{p} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} / \hbar). \quad (2.53)$$

Поэтому можно выразить оператор кинетической энергии через оператор импульса:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \quad (2.54)$$

В квантовой механике каждой физической величине сопоставляется свой оператор. Возможные значения данной величины, согласно Шредингеру, отождествляются с собственными значениями соответствующего оператора.

Совокупность собственных значений составляет *спектр* оператора. Если спектр состоит из множества дискретных собственных значений, то он называется дискретным.

Если же возможны любые значения собственных значений в некотором интервале, то спектр называется *сплошным*, или *непрерывным*. В частности, спектр энергий и импульсов свободной частицы – непрерывный. Это связано с инфинитностью движения частицы при классическом описании (т. е. с возможностью частицы уходить на бесконечно большие расстояния). Ограничение же движения частицы (финитность) в пространстве при классическом подходе сразу же приводит к дискретности спектра ее энергий и импульсов в квантовой теории.

2.10. Свободная частица в ограниченном объеме пространства

Действительно, сначала заметим, что не все волновые функции можно нормировать на единицу во всем объеме. Примером такой функции является плоская волна де Бройля (2.45), описывающая состояние свободной частицы с определенным импульсом $\mathbf{p}$. Нормировочный интеграл от нее пропорционален объему пространства, в котором находится частица, и обращается в бесконечность в бесконечном пространстве:

$$\int_V |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = |A|^2 V \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \infty. \quad (2.55)$$

Нормируемость функции можно обеспечить, поместив частицу внутри очень большого, но ограниченного объема, имеющего, например, вид куба с ребром L . На поверхности этого объема волновые функции должны удовлетворять

некоторым граничным условиям. При достаточно большом L ($L \gg \lambda$) влияние граничных условий на характер движения частицы в объеме $V = L^3$ будет очень малым. Поэтому граничные условия можно выбрать в произвольном, достаточно простом виде. Наиболее часто в качестве граничных условий принимаются условия цикличности с периодом L , т. е. требующие, чтобы волновая функция удовлетворяла условиям

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L). \quad (2.56)$$

Здесь $\psi(\mathbf{r}) = \psi(x, y, z)$ – пространственная часть функции стационарного состояния

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (2.57)$$

удовлетворяющая стационарному уравнению Шредингера (2.51)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}).$$

Давайте решим это уравнение. Перепишем его в развернутом виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z). \quad (2.58)$$

Решение ищем в виде $\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z)$. Подставляя в соотношение (2.58) и деля обе части уравнения на $\psi(x)\psi(y)\psi(z)$, получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + \frac{\psi''(y)}{\psi(y)} + \frac{\psi''(z)}{\psi(z)} \right) = E \equiv E_x + E_y + E_z. \quad (2.59)$$

Слева имеем три независимых слагаемых, зависящих от разных переменных; справа – число, которое можно представить в виде суммы трех, так что получаем три независимых одномерных уравнения второго порядка:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = E_x \psi(x), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(y) = E_y \psi(y), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(z) = E_z \psi(z). \quad (2.60)$$

Постановка в уравнения (2.60) функций

$$\psi(x_i) = c e^{\alpha_i x_i}, \quad (2.61)$$

где $\{x_i\} = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$, $\{\alpha_i\} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$, дает характеристические уравнения для определения α_i :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \alpha_i^2 = E_{x_i}. \quad (2.62)$$

Поскольку энергия свободного движения положительна, то

$$\alpha_i = \pm i \sqrt{\frac{2mE_{x_i}}{\hbar^2}} \equiv \pm i k_{x_i}, \quad (2.63)$$

где, как и ранее, $\{k_i\} = (k_1, k_2, k_3) = (k_x, k_y, k_z)$.

Таким образом,

$$E_{x_i} = \frac{\hbar^2 k_{x_i}^2}{2m}, \quad E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad \mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2. \quad (2.64)$$

Для волновых функций получаем

$$\begin{aligned} \psi^{(\pm)}(\mathbf{r}) &= \psi(x)\psi(y)\psi(z) = \\ &= A^\pm e^{\pm i k_x x} e^{\pm i k_y y} e^{\pm i k_z z} = A^\pm e^{\pm i(k_x x + k_y y + k_z z)} = A^\pm e^{\pm i \mathbf{k} \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Общее решение для волновой функции есть суперпозиция этих решений, представляющих плоские бегущие волны. Волновой вектор $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ определяет направление распространения волны и энергию состояния:

$$E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (2.66)$$

где $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ – импульс частицы.

Если волновой вектор направлен по оси x , т. е. $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$, это означает, что волновая функция зависит только от координаты x , волна распространяется вдоль этой координаты с импульсом $\hbar k$.

Действительно, вспомним зависимость волновой функции от времени:

$$\Psi_\pm(\mathbf{r}, t) = \psi_\pm(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} = A_\pm e^{-i\omega t \pm \mathbf{k} \mathbf{r}} = A_\pm e^{-i\omega t \pm kx}. \quad (2.67)$$

Значения волновых функции определяется фазами:

$$\phi^\pm = -\omega t \pm \mathbf{k} \mathbf{r} = -\omega t \pm kx. \quad (2.68)$$

Поверхность постоянного значения функции есть поверхность постоянного значения фазы:

$$\phi^\pm = -\omega t \pm \mathbf{k} \mathbf{r} = -\omega t \pm kx = \text{const}. \quad (2.69)$$

Это есть плоскость, перпендикулярная направлению $\mathbf{k}$, в нашем случае оси x , т. е. плоскость (y, z) . Координата x поверхности постоянной фазы (соответствующая, например, гребню волны, т. е. максимальному значению функции) увеличивается либо в положительном направлении оси x (плоская волна движется вправо), либо в отрицательном (движется влево):

$$\pm kx = \text{const} + \omega t. \quad (2.70)$$

Скорость этого движения (фазовая скорость волны) равна, см. выражение (2.13):

$$v_\phi = \frac{dx}{dt} = \pm \frac{\omega}{k}.$$

Вспомним теперь циклические условия равенства (2.56) на границах нашего объема. Их можно записать как

$$e^{ik_x x} = e^{ik_x(x+L)}, \quad e^{ik_y y} = e^{ik_y(y+L)}, \quad e^{ik_z z} = e^{ik_z(z+L)}. \quad (2.71)$$

Эти условия выполняются, если

$$k_x L = 2\pi n_1, \quad k_y L = 2\pi n_2, \quad k_z L = 2\pi n_3, \quad (2.72)$$

где n_1, n_2, n_3 – все целые положительные и отрицательные числа.

Таким образом,

$$k_x = \frac{2\pi n_1}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_2}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_3}{L}, \quad (2.73)$$

и введение граничных условий приводит к тому, что спектр значений вектора $\mathbf{k}$ (и импульса) становится дискретным (при переходе к пределу $L \rightarrow \infty$ расстояние между двумя ближайшими значениями $\mathbf{k}$ будет стремиться к нулю, и мы снова возвратимся к свободному движению частицы в неограниченном пространстве с непрерывным спектром). Спектр энергий в ограниченном пространстве также становится дискретным. Например, для электрона будем иметь

$$E_n = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = \frac{(2\pi\hbar n)^2}{2mL^2} = \frac{\lambda_c^2 n^2 mc^2}{2L^2} \approx \frac{(2,4)^2 \cdot 10^{-20} \cdot 0,51 \cdot 10^6 n^2}{2L^2} \text{ эВ} \approx \frac{1,5 \cdot 10^{-14} n^2}{L^2} \text{ эВ}.$$

Здесь L измеряется в сантиметрах.

Волновую функцию

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

где A – нормировочный множитель, можно теперь нормировать на единицу. Из условия

$$\int_V |\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})| dV = A^2 V = 1 \quad (2.74)$$

имеем $A = 1/\sqrt{V}$, так что нормированная волновая функция имеет вид

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (2.75)$$

Совокупность этих функций, соответствующих всем возможным значениям $\mathbf{k}$, образует систему функций, удовлетворяющих условию ортонормированности:

$$\int_V \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) dV = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}}. \quad (2.76)$$

Здесь $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}} = \delta_{k'_x k_x} \delta_{k'_y k_y} \delta_{k'_z k_z}$ – δ -символ Кронекера; $\delta_{n'n} = 0$ при $n' \neq n$ и $\delta_{n'n} = 1$ при $n' = n$. Это аналог δ -функции для случая дискретного спектра. Условие (2.76) означает, что волновые функции, отвечающие разным $\mathbf{k}$ (и, соответственно, энергиям), ортогональны друг другу и нормированы на единицу.

Функции ψ_k образуют так называемую *полную систему функций*. Это означает, что любая волновая функция, изображающая произвольное состояние движения частицы в объеме V , может быть представлена в виде линейной комбинации (суперпозиции) этих функций:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k a_k \psi_k(\mathbf{r}). \quad (2.77)$$

Коэффициенты a_k разложения функции ψ по состояниям с определенным импульсом легко вычисляются. Умножим обе части равенства (2.77) на $\psi_{k'}^*(\mathbf{r})$, затем, интегрируя по всем значениям координат в объеме V и используя соотношения ортонормированности (2.76), находим

$$\int_V \psi_{k'}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r = \sum_k a_k \int_V \psi_{k'}^*(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}) d^3r = a_{k'}. \quad (2.78)$$

Если функция $\psi(\mathbf{r})$ нормирована в объеме V , то

$$\int_V |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = \sum_{k,k'} a_k a_{k'}^* \int_V \psi_k(\mathbf{r}) \psi_{k'}^*(\mathbf{r}) dV = \sum_k |a_k|^2 = 1. \quad (2.79)$$

Коэффициенты a_k определяют долю участия (амплитуду вероятности) состояния с определенным импульсом $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ в общем состоянии $\psi(\mathbf{r})$; квадрат модуля $|a_k|^2$ определяет вероятность обнаружения у системы в состоянии $\psi(\mathbf{r})$ значения импульса $\mathbf{p}$. При этом равенство

$$\sum_k |a_k|^2 = 1, \quad (2.80)$$

являющееся условием полноты системы функций $\psi_k(\mathbf{r})$, имеет простой физический смысл: оно означает, что сумма вероятностей всех возможных значений импульса должна равняться единице.

2.11. Вычисление средних значений координаты и импульса

Знание нормированной волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ позволяет вычислить средние значения координаты, импульса и других физических величин в этом состоянии. Если учесть, что плотность вероятности определенных значений координат частицы (ее радиуса-вектора) выражается через функцию состояния как

$$\rho(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2,$$

то, согласно теореме о математическом ожидании, среднее значение $\langle \mathbf{r} \rangle$ радиуса-вектора в этом состоянии будет определяться интегралом

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) d^3r = \int \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) d^3r. \quad (2.81)$$

Точно так же вычисляется и среднее значение любой функции радиуса-вектора:

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int f(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3r = \int \psi^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r. \quad (2.82)$$

Чтобы определить среднее значение импульса $\mathbf{p}$ в данном состоянии, опять введем циклические граничные условия, рассмотренные выше. Тогда вероятность иметь импульс $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ будет определяться величиной $|a_{\mathbf{k}}|^2$, где

$$a_{\mathbf{k}} = \int_V \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r, \quad (2.83)$$

см. равенство (2.78). Зная вероятность определенного значения импульса, найдем его среднее значение по общему правилу:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} |a_{\mathbf{k}}|^2 \equiv \hbar \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* \mathbf{k} a_{\mathbf{k}}. \quad (2.84)$$

Подставляя в это выражение значения $a_{\mathbf{k}}$ из формулы (2.83) и используя равенство $\mathbf{k} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -i \nabla \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, преобразуем его к виду

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle &= \hbar \sum_{\mathbf{k}} \int_V \psi^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3r' \int_V \psi(\mathbf{r}) \mathbf{k} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) d^3r = \\ &= i\hbar \sum_{\mathbf{k}} \int_V \psi^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3r' \int_V \psi(\mathbf{r}) \nabla \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) d^3r. \end{aligned} \quad (2.85)$$

Интегрируя по частям второй интеграл в уравнение (2.85) и учитывая периодичность функций, получим

$$\begin{aligned} \int_V \psi(\mathbf{r}) \nabla \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) d^3r &= \psi(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \Big|_0^L - \int_V \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) d^3r = \\ &= - \int_V \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) d^3r, \end{aligned}$$

так что в результате

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle &= i\hbar \sum_{\mathbf{k}} \int_V \psi^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3r' \int_V \psi(\mathbf{r}) \nabla \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) d^3r = \\ &= -i\hbar \int_V \psi^*(\mathbf{r}') \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \right\} \nabla \psi(\mathbf{r}) d^3r d^3r'. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Используя соотношение

$$\sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.87)$$

для среднего значения импульса в состоянии $\psi(\mathbf{r})$, будем иметь

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{r}) d^3r = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{r}) d^3r. \quad (2.88)$$

Соотношение (2.87) можно рассматривать как разложение δ -функции по функциям $\psi_k(\mathbf{r}')$:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_k a_k \psi_k(\mathbf{r}'),$$

где из равенства (2.83) получаем

$$a_k = \int_V \psi_k^*(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3 r' = \psi_k^*(\mathbf{r}),$$

откуда и следует соотношение (2.87).

В принципе, выражение (2.88) для среднего можно также считать определением оператора импульса. Если $\psi(\mathbf{r})$ является собственной функцией оператора импульса, т. е. $\psi(\mathbf{r}) = \psi_p(\mathbf{r})$, так что $\hat{\mathbf{p}}\psi_p(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\psi_p(\mathbf{r})$, то среднее значение импульса совпадает с его собственным значением $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \mathbf{p}$.

Таким же образом можно показать, что среднее значение любой степени импульса может быть вычислено по правилу

$$\langle \mathbf{p}^n \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla)^n \psi(\mathbf{r}) d^3 r = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}}^n \psi(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (2.89)$$

Этот результат легко обобщается и на случай любой целой рациональной функции $F(\mathbf{p})$ от импульса:

$$\langle F(\mathbf{p}) \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) F(\hat{\mathbf{p}}) \psi(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (2.90)$$

Например, среднее значение кинетической энергии частицы в состоянии $\psi(\mathbf{r})$ будет определяться средним от оператора кинетической энергии:

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right\rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{r}) d^3 r = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \hat{T} \psi(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (2.91)$$

Из величины среднего для координат (2.81) следует, что операторы координат есть $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$, т. е. $\hat{x} = x$, $\hat{y} = y$, $\hat{z} = z$.

Таким образом, мы умеем вычислять средние значения функций, зависящих либо от координат, либо являющихся целыми рациональными функциями импульсов, в произвольных состояниях (описываемых нормированными волновыми функциями).

Если некоторая физическая величина F является суммой функций $F_1(\mathbf{r})$ и $F_2(\mathbf{p})$:

$$F = F_1(\mathbf{r}) + F_2(\mathbf{p}),$$

то вычисление среднего значения F в состоянии ψ сводится к вычислению интеграла

$$\langle F \rangle = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \hat{F} \psi(\mathbf{r}) d^3r, \quad (2.92)$$

где величина

$$\hat{F} = F_1(\mathbf{r}) + F_2(-i\hbar\nabla) \quad (2.93)$$

в общем случае есть дифференциальный оператор. Будем называть его оператором, соответствующим физической величине F , или просто *оператором физической величины* F .

Таким образом, в классической механике все физические величины являются функциями координат и импульсов. В квантовой же механике каждой физической величине G сопоставляется свой оператор $\hat{G}$. Возможные значения G данной величины отождествляются с собственными значениями оператора:

$$\hat{G}\psi_G = G\psi_G. \quad (2.94)$$

Эти значения образуют непрерывный или дискретный спектр величины G . В состоянии, которое описывается собственной функцией оператора, соответствующая ему физическая величина имеет определенное значение, равное собственному значению оператора. При этом среднее этой величины совпадает с собственным значением:

$$\langle G \rangle = \int_V \psi_G^*(\mathbf{r}) \hat{G} \psi_G(\mathbf{r}) d^3r = G \int_V \psi_G^*(\mathbf{r}) \psi_G(\mathbf{r}) d^3r = G. \quad (2.95)$$

В произвольном состоянии $\psi(\mathbf{r})$ величина G может не иметь определенного значения, тогда ее среднее значение определяется выражением (2.92) как

$$\langle \hat{G} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}) \hat{G} \psi(\mathbf{r}) d^3r \equiv \langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle. \quad (2.96)$$

Смысл краткой записи интеграла в равенстве (2.96) прояснится позже.

А сейчас еще обратим внимание на то, что в квантовой механике появляются новые физические величины (например, спин частицы), не имеющие аналогов в классической физике. Тем не менее правило (2.92) нахождения среднего значения величины G в состоянии ψ можно обобщить на случай произвольных физических величин, если найдем способ построения соответствующих операторов и волновых функций.

2.12. Уравнение Шредингера для частицы в силовом поле

Теперь можно обобщить теорию на случай присутствия силового поля, характеризующего классической потенциальной энергией $V(\mathbf{r})$.

Оператор энергии определим как сумму операторов кинетической и потенциальной энергии частицы, что весьма естественно (этот оператор называется *оператором Гамильтона*):

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (2.97)$$

а для волновой функции частицы напомним уравнение Шредингера в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi. \quad (2.98)$$

Оправданием этого служит так называемый *принцип соответствия Бора* (см. статью [24]), согласно которому результаты квантовой теории должны совпадать с результатами классической механики в той области, в которой последняя заведомо применима.

Нормировочный интеграл по-прежнему сохраняется, что следует из уравнения неразрывности (2.43), которое, как нетрудно убедиться, сохраняет свой вид и в присутствии силового поля. На решение уравнения и его фурье-образ $\Phi(\mathbf{p}, t)$ распространяется вероятностная трактовка, но только $\Phi(\mathbf{p}, t)$ уже нельзя представить в виде

$$\Phi(\mathbf{p}, t) = \varphi(\mathbf{p}) e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t}, \quad (2.99)$$

как это было в случае свободной частицы.

В стационарном состоянии волновая функция также представляется в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i \frac{Et}{\hbar}} = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (2.100)$$

где для определения собственных значений полной энергии E нужно решить так называемое *стационарное уравнение Шредингера*

$$\hat{H} \psi = -\frac{\hbar^2 \nabla^2 \psi}{2m} + V(\mathbf{r}) \psi = E \psi. \quad (2.101)$$

Шредингер [20] показал, что для частицы в кулоновском поле притяжения (например, для электрона в атоме водорода), когда $V(\mathbf{r}) = -e^2/r$, при $E < 0$ конечные, непрерывные и однозначные решения существуют лишь при значениях энергий $E_1, E_2, \dots$, которые в точности совпадают с уровнями энергий (1.33), найденными Н. Бором. Для собственных функций дискретного спектра ($E_n < 0$) нормировочный интеграл является конечным, т. е. их можно нормировать на единицу. При $E \geq 0$ спектр для рассматриваемого случая кулоновского поля притяжения оказывается сплошным (инфинитное движение).

Упомянем некоторые соображения о роли релятивистских эффектов, принадлежащие Л. Д. Ландау и Р. Паерлсу [25].

Вернемся к соотношению неопределенностей $\Delta z \Delta p_z \approx 2\pi\hbar$. Если мы локализуем частицу в узкой области пространства Δz , такой, что Δp_z достигает величины (которой отвечает энергия $> mc^2$), то становится возможным рождение пар частиц и античастиц (например, рождение позитрона и электрона при столкновении двух электронов). Значению $\Delta p_z \sim mc$ отвечает неопределенность $\Delta z \approx 2\pi\hbar / mc = \lambda_c$. Поэтому при $\Delta z < \lambda_c$ понятие координаты частицы теряет

смысл. Начинают рождаться пары, число частиц тоже перестает сохраняться. Эффекты рождения пар при больших энергиях не только ограничивают смысл понятия координаты, но и сама теория движения одной частицы теряет смысл.

Тем не менее существует очень широкий круг задач, в которых релятивистские эффекты несущественны. Они и образуют область нерелятивистской квантовой механики.

Глава 3. Одномерные задачи квантовой механики

Рассмотрим движение по оси x . Оператор Гамильтона (энергии) в этом случае имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (3.1)$$

Собственные функции этого оператора, соответствующие собственным значениям энергии E_n , удовлетворяют стационарному уравнению Шредингера:

$$\hat{H}\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_n'' + V(x)\psi_n = E_n\psi_n \quad (3.2)$$

или

$$\psi_n'' = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E_n] \psi_n. \quad (3.3)$$

Решения этого уравнения ищутся в классе однозначных и непрерывных функций. В случае связанных состояний (дискретные энергии) эти функции нормируемы, для них $\int dx |\psi_n(x)|^2 = 1$, поэтому $\psi_n \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$.

Сначала обсудим некоторые общие свойства этих решений.

3.1. Свойства решений одномерного уравнения Шредингера

3.1.1. Поведение производной $\psi_n'(x)$ определяется видом потенциала

Интегрируя уравнение Шредингера в малой окрестности точки $x = a$, получаем

$$\begin{aligned} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \psi_n''(x) dx &= \psi_n'(a+\varepsilon) - \psi_n'(a-\varepsilon) = \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx [V(x) - E] \psi_n(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \psi_n(a) \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} V(x) dx, \end{aligned}$$

так что

$$\psi_n'(a+\varepsilon) - \psi_n'(a-\varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \psi_n(a) \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} V(x) dx. \quad (3.4)$$

У потенциалов, имеющих разрывы второго рода (a является точкой разрыва второго рода, если пределов $\lim_{x \rightarrow +a} V(x)$ или $\lim_{x \rightarrow -a} V(x)$ не существует или они об-

ращаются в бесконечность), $\psi'_n(x)$ может иметь разрывы первого рода (т. е. конечный скачок функции (разность ее значений слева и справа от точки разрыва)). Например, для $V(x) = -G \delta(x - a)$ имеем

$$\psi'(a + \varepsilon) - \psi'(a - \varepsilon) = -\frac{2mG}{\hbar^2} \psi(a). \quad (3.5)$$

3.1.2. Дискретные уровни в одномерной задаче всегда не вырождены

Покажем, что в одномерном потенциале дискретные уровни энергии не вырождены. Это означает, что каждому собственному значению энергии соответствует единственная собственная функция.

Допустим обратное: пусть $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ – две разные собственные функции, отвечающие одному значению E . Тогда из равенства (3.3) следует

$$\frac{\psi_1''(x)}{\psi_1(x)} = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E) = \frac{\psi_2''(x)}{\psi_2(x)}, \quad (3.6)$$

т. е.

$$\psi_1''(x)\psi_2(x) - \psi_2''(x)\psi_1(x) = 0 = \frac{d}{dx}(\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1). \quad (3.7)$$

Отсюда следует, что $\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1 = \text{const} = 0$, поскольку это равенство справедливо при любых x , а при $x \rightarrow \infty$, $\psi_{1,2} \rightarrow 0$ или

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} - \frac{\psi_2'}{\psi_2} = \frac{d}{dx}(\ln \psi_1 - \ln \psi_2) = \frac{d}{dx} \left(\ln \frac{\psi_1}{\psi_2} \right) = 0. \quad (3.8)$$

В итоге

$$\ln \frac{\psi_1}{\psi_2} = A \rightarrow \frac{\psi_1}{\psi_2} = e^A = C,$$

где A и C – некоторые постоянные, так что

$$\psi_1 = C\psi_2, \quad (3.9)$$

и, следовательно, волновые функции ψ_1, ψ_2 описывают одно и то же состояние.

3.1.3. В одномерной задаче дискретные уровни четного гамильтониана имеют определенную четность

Убедимся, что в четном одномерном потенциале все состояния имеют определенную четность – положительную или отрицательную. Это означает, что если $H(x) = H(-x)$, т. е., как говорят, гамильтониан инвариантен относительно инверсии координаты (является четной функцией координаты), то собственные функции $\psi_n(x)$ такого гамильтониана являются либо четными $\psi_n(-x) = +\psi_n(x)$, либо нечетными $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$ функциями координаты.

Действительно, для такого гамильтониана функции $\psi_n(x)$ и $\psi_n(-x)$ есть решения, отвечающие одному и тому же значению E_n , т. е., по предыдущему утверждению (3.8), $\psi_n(-x) = C\psi_n(x)$. Сделав замену $x \rightarrow -x$, получим

$$\psi_n(x) = C\psi_n(-x) = C^2\psi_n(x), \quad (3.10)$$

откуда действительно следует $C = \pm 1$.

Заметим, что любую функцию $F(x)$ можно представить в виде суммы четной и нечетной функций $F^{(+)}(x)$ и $F^{(-)}(x)$:

$$F(x) \equiv \frac{1}{2}[F(x) + F(-x)] + \frac{1}{2}[F(x) - F(-x)] = F^{(+)}(x) + F^{(-)}(x), \quad (3.11)$$

где

$$F^{(+)}(x) = \frac{1}{2}[F(x) + F(-x)], \quad F^{(-)}(x) = \frac{1}{2}[F(x) - F(-x)]. \quad (3.12)$$

3.2. Прямоугольная потенциальная яма глубиной V_0 и шириной $2a$

Рассмотрим движение частицы в одномерном прямоугольном потенциале, изображенном на рис. 3.1.

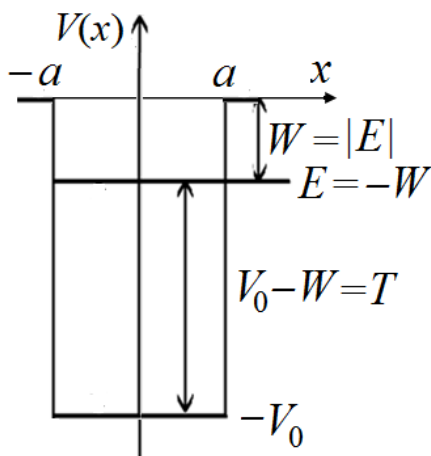


Рис. 3.1. Движение частицы в потенциальной яме (т. е. отрицательном потенциале) $V(x)$ прямоугольной формы: V_0 – глубина ямы; $2a$ – ее ширина; $W > 0$ – энергия связи частицы в яме; $E = -W$ – полная энергия связанного состояния; $T = V_0 - W > 0$ – кинетическая энергия частицы внутри ямы. В классической механике доступная область движения частицы ограничена $-a \leq x \leq a$. В квантовой механике частица может заходить и за пределы этой области, где ее кинетическая энергия становится отрицательной

Потенциальная энергия частицы имеет вид

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{при } |x| \leq a, \\ 0 & \text{при } |x| > a. \end{cases} \quad (3.13)$$

Классическое движение частицы в таком потенциале при $E > 0$ – инфинитно (частица может уйти на бесконечное расстояние), при $E < 0$ – финитно, оно строго ограничено стенками ямы (связанное состояние). Что же будет в квантовой механике?

Обозначим через $W = -E$ энергию связи частицы. Тогда ее кинетическая энергия равна

$$T \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E - V(x) = \begin{cases} E + V_0 = V_0 - W, & |x| \leq a, \\ E = -W, & |x| > a, \end{cases} \quad (3.14)$$

т. е. вне ямы при ненулевой энергии связи она является отрицательной.

Перепишем уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x) \psi = E \psi \quad (3.15)$$

в виде

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + T(x) \psi = 0. \quad (3.16a)$$

Тогда внутри ямы оно запишется в виде

$$\psi'' + k^2 \psi = 0, \quad |x| \leq a, \quad (3.16b)$$

где

$$k^2 = \frac{2mT}{\hbar^2} = \frac{2m(V_0 - W)}{\hbar^2} \geq 0, \quad (3.16b)$$

т. е. волновой вектор является вещественным, и решения уравнения (3.16b) будут иметь вид бегущих волн (см. равенство (2.70)):

$$\psi \sim e^{\pm i k x}. \quad (3.16\Gamma)$$

Вне же ямы

$$k^2 = \frac{2mT}{\hbar^2} = -\frac{2mW}{\hbar^2} < 0, \quad (3.17a)$$

т. е. волновой вектор является чисто мнимым: $k = i\sqrt{2mW/\hbar^2} \equiv i\kappa$, где

$$\kappa = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}} \quad (3.17b)$$

является вещественной положительной величиной, так что уравнение (3.16a) вне ямы приобретает вид

$$\psi'' - \kappa^2 \psi = 0, \quad |x| > a, \quad (3.18a)$$

а его решения,

$$\psi \sim e^{\pm \kappa x}, \quad (3.18б)$$

либо убывают, либо возрастают с удалением от начала координат.

Общим решением задачи является в области внутри ямы суперпозиция волн (3.16г), а в области вне ямы – суперпозиция решений (3.18б). Коэффициенты в этих суперпозициях находятся из граничных условий, которые определяются физическими требованиями задачи. Так, например, мы ищем решения, убывающие на бесконечности, т. е. $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$. Кроме того, волновая функция $\psi(x)$ и ее производная $\psi'(x)$ должны быть непрерывными, а еще волновая функция должна быть либо четной, либо нечетной функцией x , поскольку $H(x) = H(-x)$.

Обратим теперь внимание на очень важное обстоятельство, вытекающее из полученного внешнего решения (3.18б). Из него следует, что частица с некоторой вероятностью может находиться в области $x > a$, совершенно недоступной в классической физике, в области под потенциальным барьером высотой W , причем эта вероятность убывает экспоненциально с ростом высоты барьера.

Если же барьер имеет конечную ширину, то есть конечная вероятность обнаружить частицу за барьером, иначе говоря, проникнуть через барьер. Это существенно квантовое явление носит название *туннельного эффекта*.

Сначала рассмотрим четные решения. Для четного решения в области $|x| \leq a$ внутри ямы, используя выражение (3.12), можно написать следующую суперпозицию бегущих волн (3.16г):

$$\psi_{\text{int}}(x) = \frac{A}{2}(e^{ikx} + e^{-ikx}) = A \cos kx, \quad |x| \leq a, \quad (3.19)$$

а в области $|x| > a$ вне ямы условие убывания функций на бесконечности выделяет из соотношения (3.18б) следующее четное решение:

$$\psi_{\text{ext}}(x) = B e^{-\kappa|x|}, \quad |x| > a. \quad (3.20)$$

Волновая функция и ее производная должны быть непрерывны на границах ямы в точках $x = \pm a$. Чтобы это обеспечить, достаточно приравнять (сшить) логарифмические производные внутреннего и внешнего решений на этих границах, т. е.

$$\frac{\psi'_{\text{int}}(a)}{\psi_{\text{int}}(a)} = \frac{\psi'_{\text{ext}}(a)}{\psi_{\text{ext}}(a)} \quad (3.21)$$

или $k \operatorname{tg} ka = \kappa$. Вспоминая (3.16б) и (3.17б), имеем

$$W = V_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}, \quad (3.22)$$

так что

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1}.$$

Трансцендентное уравнение относительно k ,

$$\operatorname{tg} ka = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1}, \quad (3.23)$$

определяет дискретный набор волновых векторов k , а также импульсов и энергий $E = -W$. Он легко находится для достаточно глубокой ямы и глубоких уровней, т. е. когда

$$\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} \gg 1.$$

Это означает, что и $\operatorname{tg} ka \gg 1$, а следовательно, $\cos ka \approx 0$. Таким образом,

$$k_n a \approx (2n+1) \frac{\pi}{2}, \quad (3.24)$$

где n – целое число.

Соотношение (3.24) определяет спектры волновых векторов и кинетических энергий, отсчитываемых от дна ямы:

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{(2n+1)\pi}{2a}, \quad (3.25)$$

где λ_n – длина волны частицы в яме. Соотношение (3.25) можно переписать в виде

$$2a = \frac{\lambda_n}{2} (2n+1), \quad (3.26)$$

из которого следует, что четные состояния реализуются только тогда, когда на ширине ямы $2a$ укладывается нечетное число полуволн. Спектр кинетических энергий четных состояний (отсчитываемых от дна ямы) имеет вид (рис. 3.2)

$$T_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (2n+1)^2}{2m(2a)^2}. \quad (3.27)$$

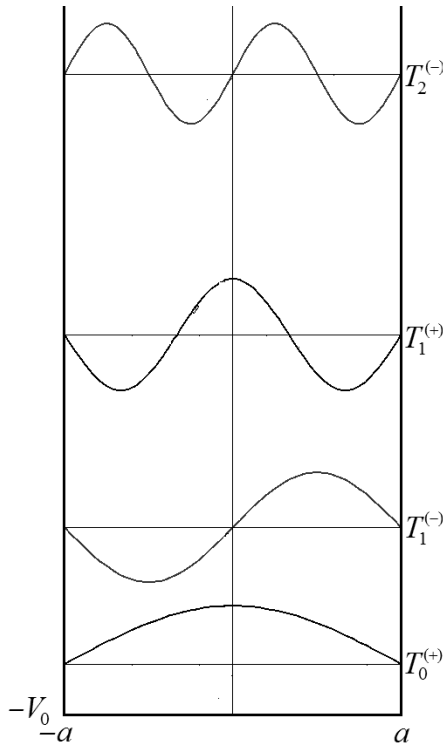


Рис. 3.2. Нижние четные и нечетные решения одномерного уравнения Шредингера. Уровни появляются, когда на ширине $L = 2a$ ямы укладывается целое число полувольт. Основное состояние с минимальной энергией T_0 (т. е. с максимальной длиной волны) является четным. Далее уровни чередуются. Четные уровни появляются, когда на ширине ямы укладывается нечетное число полувольт, нечетные – четное число. Если нумеровать уровни подряд: 0, 1, 2, 3, ..., то волновая функция основного состояния не имеет узлов (не обращается в нуль внутри ямы), т. е. имеет ноль узлов; первого состояния – один узел; второго – два узла и т. д.

Заметим, что поскольку в рассматриваемом случае $T_n \ll V_0$, то и $W_n \gg T_n$, следовательно, $ka \gg k_n a \gg 1$. Это означает, что внешняя волновая функция очень быстро на расстояниях от границ ямы (много меньших ее размера) убывает, поэтому внутреннюю волновую функцию (3.19) можно положить нулем на границах ямы, что и соответствует условию (3.24).

Из равенства (3.25) следует, что в основном состоянии имеем минимальный импульс и, соответственно, максимальную длину волны частицы:

$$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} = \frac{\pi}{2a} \rightarrow 2a \equiv L = \frac{\lambda_0}{2}, \quad (3.28)$$

т. е. на ширине ямы укладывается одна полуволна, а минимальный импульс $\hbar k_0$ (не равный нулю!) соответствует по соотношению неопределенностей размеру ямы.

Для первого возбужденного состояния имеем

$$k_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1} = \frac{3\pi}{2a} \rightarrow L = 3\frac{\lambda_1}{2}, \quad (3.29)$$

т. е. на ширине ямы три полуволны.

Обратимся к нечетным решениям. Они имеют вид

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin kx, & |x| \leq a, \\ B \frac{x}{|x|} e^{-\kappa|x|} & |x| > a. \end{cases} \quad (3.30)$$

Граничные условия в этом случае дают

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{\kappa}{k} = -\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1}. \quad (3.31)$$

В этом случае для глубоких уровней при $ka \gg 1$, в отличие от соотношения (3.24), имеем

$$\sin ka \approx 0, \text{ или } k_n a = \pi n, \text{ или } 2a = n\lambda \equiv 2n \frac{\lambda}{2}, \quad (3.32)$$

т. е. нечетные состояния реализуются, когда на ширине ямы $2a$ укладывается четное число полуволен, так что спектр кинетических энергий нечетных состояний, отсчитываемых от дна ямы, определится как (см. рис. 3.2)

$$T_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \equiv \frac{\hbar^2 \pi^2 (2n)^2}{2m(2a)^2}. \quad (3.33)$$

Нетрудно видеть, что он дополняет спектр четных решений (3.27). Заметим, что со спектром (2.74) в ограниченном ящике с $L = 2a$ (при циклических граничных условиях) совпадает только спектр нечетных решений (3.33):

$$E_n = T_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2}{mL^2} \equiv \frac{\pi^2 \hbar^2 (2n)^2}{2m(2a)^2}.$$

Энергию n -го уровня можно выразить через энергию основного состояния:

$$T_n = T_0 (n+1)^2, \quad T_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2a)^2} \equiv \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{\pi^2}{2} \frac{\lambda_c^2}{L^2} mc^2. \quad (3.34)$$

Формула (3.34) также свидетельствует о том, что если размер ямы уменьшается до размеров комптоновской длины волны частицы, то ее энергия становится больше энергии покоя, и наша теория одной частицы в потенциальной яме становится неприменимой. Она справедлива только при $L \gg \lambda_c$.

Заметим, что, если частица удерживается внутри ящика, это означает, что ее координаты ограничены его размерами $L = 2a$, поэтому она не может покоиться, у нее имеется неопределенность в импульсе $\Delta p \approx 2\pi\hbar/L$, и, соответственно, минимальная кинетическая энергия имеет порядок

$$\Delta E \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} \approx \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2},$$

что и отражает формула (3.34). Чтобы такую частицу удержать внутри ящика, казалось бы, глубина V_0 потенциала должна быть больше этой неопределенности:

$$V_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2},$$

иначе частица «выпрыгнет» из ящика. В трехмерном потенциале так оно и есть. Однако в одномерном случае в мелкой яме из-за малости энергии связи частица может довольно далеко уходить за пределы ямы, оставаясь в связанном состоянии. Поэтому в любой одномерной яме всегда есть связанный уровень.

3.3. Уровень в мелкой яме

Итак, рассмотрим, что произойдет в мелкой яме при

$$V_0 \ll \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (3.35)$$

В этом случае длина затухания волновой функции $\ell \equiv \kappa^{-1}$ так же, как и длина волны, много больше размеров ямы.

Действительно, если частица находится на дне ямы ($E \sim -V_0$, в этом случае ее кинетическая энергия T минимальна, а энергия связи W максимальна и равна $W_{\max} = \hbar^2 \kappa_{\max}^2 / 2 \sim V_0$), то у нее наименьшая длина затухания $\ell_{\min} \equiv \kappa_{\max}^{-1}$, причем из выражения (3.35) с использованием формулы (3.17б) следует, что

$$\frac{\hbar^2}{2mV_0 a^2} = \frac{1}{\kappa_{\max}^2 a^2} = \frac{\ell_{\min}^2}{a^2} \gg 1, \quad (3.36)$$

т. е. даже минимальная длина затухания много больше размера ямы.

Точно так же, если частица находится на поверхности ямы ($E \sim 0$, где ее кинетическая энергия максимальна $T_{\max} = \hbar^2 k_{\max}^2 / 2 \sim V_0$, а энергия связи около нуля), ее длина волны минимальна, так что в этом случае из выражения (3.35) с использованием равенства (3.16в) следует, что

$$\frac{\hbar^2}{2mV_0 a^2} = \frac{1}{k_{\max}^2 a^2} = \frac{\lambda_{\min}^2}{(2\pi a)^2} \gg 1, \quad (3.37)$$

т. е. даже минимальная длина волны такой частицы много больше размера ямы.

Таким образом, в рассматриваемом случае $ka \ll 1$ и граничное условие $k \operatorname{tg} ka = \kappa$ имеет единственное решение для энергии связи (граничное условие (3.31) для нечетной функции их совсем не имеет). Действительно, в этом случае $\operatorname{tg} ka \approx ka$, так что

$$k^2 = \frac{\kappa}{a}, \Rightarrow \frac{2m(V_0 - W)}{\hbar^2} = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2 a^2}}. \quad (3.38)$$

Возводя в квадрат последнее равенство из выражений (3.38), получаем квадратное уравнение для энергии связи частицы

$$W^2 - 2W(V_0 + \Delta_\varepsilon) + V_0^2 = 0, \quad (3.39)$$

где мы ввели величину $\Delta_\varepsilon = \hbar^2 / 4ma^2$, которая имеет порядок неопределенности кинетической энергии в яме, причем $\Delta_\varepsilon \gg V_0$.

Решения этого уравнения:

$$W = V_0 + \Delta_\varepsilon \pm \sqrt{2V_0\Delta_\varepsilon + \Delta_\varepsilon^2} = V_0 + \Delta_\varepsilon \pm \Delta_\varepsilon \sqrt{1 + \frac{2V_0}{\Delta_\varepsilon}},$$

или, раскладывая корень в ряд, получим два значения энергии связи:

$$W = V_0 + \Delta_\varepsilon \pm \left(\Delta_\varepsilon + V_0 - \frac{V_0^2}{2\Delta_\varepsilon} + \dots \right), \quad (3.40)$$

одно из которых (со знаком «плюс») превышает глубину ямы, что не имеет физического смысла. Таким образом, внутри ямы (вблизи ее поверхности) имеется только одно состояние с энергией, равной

$$E = -W, \quad W \approx \frac{V_0^2}{2\Delta_\varepsilon} = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} V_0 \ll V_0. \quad (3.41)$$

Поскольку

$$W = \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} \equiv \frac{\hbar^2}{2m\ell^2} \ll V_0 \ll \Delta_\varepsilon$$

и

$$\kappa_0 \equiv \frac{1}{\ell} = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{4m^2V_0^2a^2}{\hbar^4}} = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{a} \ll \frac{1}{a}, \quad (3.42)$$

то длина затухания намного превосходит размер ямы $\ell \gg a$. Следовательно, основная часть волновой функции простирается далеко за пределы ямы, т. е. вероятность обнаружить там частицу довольно высока.

Поскольку длина волны частицы также существенно превосходит размер ямы, то решение в узкой области внутри ямы практически постоянно, оно есть $A \cos kx \approx A$, за пределами же ямы функция имеет вид

$$\psi(x) = B e^{-\kappa_0|x|}, \quad (3.43)$$

причем в силу непрерывности $A = B$. Чтобы нормировать волновую функцию, вычислим нормировочный интеграл:

$$2B^2 \left(\int_a^\infty |\psi(x)|^2 dx + \int_0^a dx \right) = 2B^2 \left(\int_a^\infty e^{-2\kappa_0 x} dx + a \right) \approx \frac{B^2}{\kappa_0}. \quad (3.44)$$

В выражении (3.44) учтено, что $\exp(-2\kappa_0 a) \approx 1$ и $\kappa_0^{-1} \gg a$. Приравняв интеграл (3.44) единице, получаем $B = \sqrt{\kappa_0}$, так что нормированная функция (рис. 3.3) приобретает вид

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\kappa_0} = \frac{1}{\sqrt{\ell}}, & |x| \leq a, \\ \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|} = \frac{1}{\sqrt{\ell}} e^{-\frac{|x|}{\ell}}, & |x| > a. \end{cases} \quad (3.45)$$

Причем основная площадь под функцией (см. выражение (3.44)) приходится на внешнюю область и определяется величиной κ_0 , пропорциональной, как следует из формулы (3.42), произведению $2aV_0$, которое называется *мощностью ямы в одномерном случае*.

Устремим теперь ширину ямы к нулю, а глубину – к бесконечности, так чтобы ее мощность (площадь на рис. 3.3) и, соответственно, энергия состояния оставались постоянными. Тогда в качестве волновой функции этого состояния остается только ее внешняя часть, а ее производная, имеющая разные знаки слева и справа от начала координат: $\psi'(\mp\epsilon \rightarrow 0) = \pm\kappa_0^{3/2}$, – приобретает скачок, равный

$$\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon) = -2\kappa_0^{3/2} = -\frac{2mG}{\hbar^2} \psi(0) = -\frac{2mG}{\hbar^2} \kappa_0^{1/2}, \quad (3.46)$$

который совпадает со скачком (3.5) для дельтаобразной ямы при

$$G = \frac{\hbar^2 \kappa_0}{m} = 2V_0 a = 2\ell W. \quad (3.47)$$

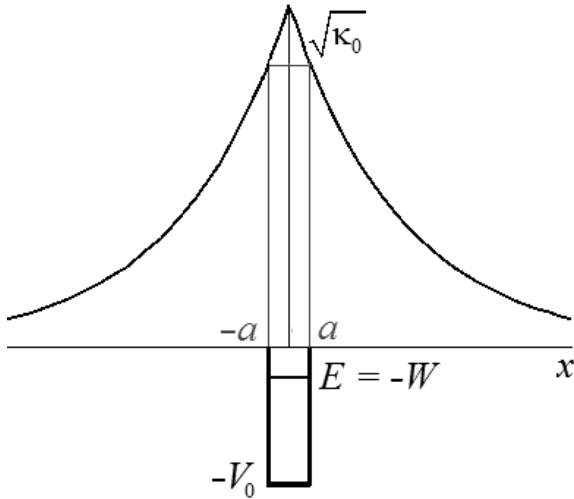


Рис. 3.3. Вид волновой функции слабо-связанного состояния в мелкой яме шириной $2a$ и глубиной V_0 , т. е. с мощностью $2aV_0$

Таким образом, решение в мелкой яме можно использовать для точечного потенциала $V(x) = -G\delta(x)$. Оно будет иметь вид

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|}, \quad \kappa_0 = \frac{Gm}{\hbar^2}, \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} = -\frac{G\kappa_0}{2} \quad (3.48)$$

во всей области изменения x , за исключением точки $x = 0$, внутри ямы.

3.4. Двухуровневая система

Рассмотрим теперь задачу о поведении частицы в потенциале двух таких одинаковых точечных ям (дельтаобразных потенциалов), расположенных на расстоянии $2b$ ($b \gg 1/\kappa_0 = \ell$) друг от друга, т. е. в симметричном потенциале:

$$V(x) = -G\delta(x+b) - G\delta(x-b). \quad (3.49)$$

При достаточно большом b частица может находиться либо в первой, либо во второй яме, причем волновые функции в этих состояниях имеют вид

$$\psi_1(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x+b|}, \quad \psi_2(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x-b|}, \quad (3.50)$$

где (см. равенства (3.42, 3.47))

$$\kappa_0 = \sqrt{\frac{2mW_0}{\hbar^2}} = \frac{2mV_0a}{\hbar^2} \bigg|_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ a_0 \rightarrow 0}} \equiv \frac{mG}{\hbar^2}, \quad E_0 = -W_0. \quad (3.51)$$

Здесь W_0 – энергия связи частицы в каждой из ям.

При $b \rightarrow \infty$ волновые функции ψ_1 и ψ_2 не перекрываются, т. е. они ортогональны:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx = 0. \quad (3.52)$$

Это означает, что частица может находиться в одном из двух состояний с одинаковой энергией либо в одной, либо в другой яме бесконечно долго, не перепрыгивая из одной ямы в другую. Между ямами она находится под барьером высотой W_0 и шириной $2b$. С классической точки зрения эта область совершенно недоступна для частицы при любой ширине барьера. Однако при уменьшении расстояния между ямами возникает увеличивающаяся вероятность найти частицу во второй яме за счет упомянутого эффекта туннелирования. К чему это приводит, рассмотрим ниже более детально.

Примером может являться система из электрона и двух протонов (молекулярный ион водорода). Одно из состояний – это атом водорода с ядром из первого протона и вторым протоном, а второе – первый протон и атом водорода со вторым протоном в качестве ядра. Если протоны находятся на достаточно большом расстоянии друг от друга, то вероятность найти электрон из атома вблизи второго протона экспоненциально мала. Когда же протоны сближаются на достаточное расстояние, электрон становится общим для протонов, протоны как бы обмениваются электроном. В результате такого обмена образуется связанное состояние из двух протонов и электрона – молекулярный ион водорода.

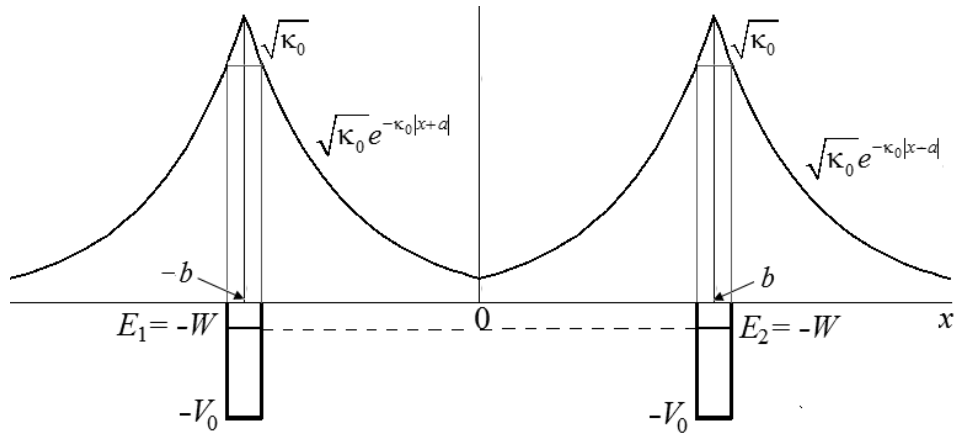


Рис. 3.4. Частица в поле двух мелких ям с мощностью $G = 2aV_0$ на расстоянии $2b$ друг от друга

Итак, в первом приближении (при больших b) функции (3.50)

$$\psi_{1,2}(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x \pm b|}, \quad E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} = -W_0$$

ортогональны и удовлетворяют уравнению Шредингера с потенциалом (3.49) при $b \rightarrow \infty$, который мы обозначим как H_0 :

$$H_0 \psi_{1,2}(x) = E_0 \psi_{1,2}(x). \quad (3.53)$$

Чтобы выяснить, что произойдет при сближении ям, нам нужно решить уравнение Шредингера при произвольном b :

$$H\psi \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - G\delta(x+b) - G\delta(x-b) \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (3.54)$$

затем найти новые собственные функции и энергии такой системы. Как мы отмечали, при сближении ям появляется заметная вероятность того, что частица из первой ямы протуннелирует во вторую и часть времени будет проводить во второй яме, что исказит ее волновую функцию. К функции $\psi_1(x)$ примешается $\psi_2(x)$, и наоборот. Таким образом, вполне естественно искать решение уравнения (3.54) в виде суперпозиции невозмущенных соседней ямой функций

$$\psi = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x), \quad (3.55)$$

где c_1 и c_2 – амплитуды вероятности найти частицу в состояниях $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$, т. е. в первой или во второй яме соответственно. Будем считать эти функции ортогональными, что имеет место при $b \rightarrow \infty$, а также учтем, что они нормированы:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{1,2}^*(x) \psi_{1,2}(x) dx \equiv \langle \psi_{1,2} | \psi_{1,2} \rangle = 1.$$

Подставив нашу суперпозицию (3.55) в уравнение (3.54), имеем

$$c_1 H \psi_1 + c_2 H \psi_2 = E \{c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2\}. \quad (3.56)$$

Умножая уравнение (3.56) последовательно слева на $\psi_1^*(x)$ и $\psi_2^*(x)$, затем интегрируя по dx , получаем систему двух алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} c_1 H_{11} + c_2 H_{12} &= c_1 E, \\ c_1 H_{21} + c_2 H_{22} &= c_2 E, \end{aligned} \quad (3.57)$$

где мы обозначили через

$$H_{ik} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) H \psi_k(x) dx \equiv \langle \psi_i | H | \psi_k \rangle \quad (3.58)$$

так называемые *матричные элементы оператора H* (обозначения с угловыми скобками мы детально обсудим далее). Перепишем систему (3.57) в виде

$$\begin{aligned} c_1 (H_{11} - E) + c_2 H_{12} &= 0, \\ c_1 H_{21} + c_2 (H_{22} - E) &= 0. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Это есть система линейных однородных уравнений для определения амплитуд c_1, c_2 . Условием разрешимости этой системы является равенство нулю ее определителя (так называемое *секулярное уравнение*):

$$(H_{11} - E)(H_{22} - E) - H_{12}H_{21} = 0. \quad (3.60)$$

Это квадратное уравнение относительно искоемых энергий E , оно имеет два решения. Таким образом, происходит расщепление вырожденных по энергии невозмущенных состояний, отвечающих нахождению частицы в одной либо другой яме. Величина расщепления определяется матричным элементом H_{12} , который характеризует амплитуду «перескока» частицы из одной ямы в другую.

Для начала вычислим степень неортогональности функций $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ в зависимости от b , т. е. интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx \equiv \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle. \quad (3.61)$$

Он как раз и представляет амплитуду вероятности найти частицу, связанную в одной из ям, в связанном состоянии в другой яме, т. е. амплитуду туннелирования частицы из одной ямы в другую. Поскольку функции вещественны, то

$$\psi_1^* \psi_2 = \psi_1 \psi_2 = \kappa_0 e^{-\kappa_0(|x+b|+|x-b|)}. \quad (3.62)$$

Учитывая, что

$$|x+b|+|x-b| = \begin{cases} 2x, & x > b \\ 2b, & -b < x < b \\ -2x, & x < -b \end{cases} \quad (3.63)$$

и $\kappa_0 b = b / \ell \gg 1$, имеем

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{-b} \kappa_0 e^{2\kappa_0 x} dx + \int_{-b}^b \kappa_0 e^{2\kappa_0 b} dx + \int_b^{\infty} \kappa_0 e^{-2\kappa_0 x} dx = \\ &= e^{-2\kappa_0 b} + 2\kappa_0 b e^{-2\kappa_0 b} = e^{-2\kappa_0 b} (1 + 2\kappa_0 b) \equiv Q \approx 2\kappa_0 b e^{-2\kappa_0 b}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Как видим из выражения (3.64), при $\kappa_0 b \gg 1$ интеграл перекрытия Q экспоненциально мал, даже при $\kappa_0 b = b / \ell = 4$ он равен $Q \approx 0,003$.

Вычислим матричные элементы, входящие в систему (3.59), используя выражения

$$\psi_{1,2}(x) = \sqrt{\kappa} \left[e^{-\kappa_0 |x \pm b|} \right] = \begin{cases} \sqrt{\kappa_0} e^{\pm \kappa_0 b} e^{\kappa_0 x}, & x < -b \\ \sqrt{\kappa_0} e^{\mp \kappa_0 x} e^{-\kappa_0 b}, & -b < x < b. \\ \sqrt{\kappa_0} e^{\mp \kappa_0 b} e^{-\kappa_0 x}, & x > b \end{cases} \quad (3.65)$$

Тогда

$$\begin{aligned} H_{11} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) H \psi_1(x) dx = \\ &= \underbrace{\int_{-\infty}^{-b} \psi_1^*(x) H \psi_1(x) dx}_{I_1} + \underbrace{\int_{-b}^b \psi_1^*(x) H \psi_1(x) dx}_{I_2} + \underbrace{\int_b^{\infty} \psi_1^*(x) H \psi_1(x) dx}_{I_3}, \end{aligned} \quad (3.66)$$

где

$$\begin{aligned} I_1 &= - \int_{-\infty}^{-b} \kappa_0 e^{\kappa_0 x} e^{\kappa_0 b} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{\kappa_0 x} e^{\kappa_0 b} dx = - \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} \frac{\kappa_0}{2\kappa_0} e^{2\kappa_0 b} e^{2\kappa_0 x} \Big|_{-\infty}^{-b} = - \frac{1}{2} W_0, \\ I_2 &= - \int_{-b}^b \kappa_0 e^{-\kappa_0 x} e^{-\kappa_0 b} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\kappa_0 x} e^{-\kappa_0 b} dx = \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} \frac{\kappa_0}{2\kappa_0} e^{-2\kappa_0 b} e^{-2\kappa_0 x} \Big|_{-b}^b = \frac{1}{2} W_0 (e^{-4\kappa_0 b} - 1), \\ I_3 &= - \int_b^{\infty} \kappa_0 e^{-\kappa_0 x} e^{-\kappa_0 b} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\kappa_0 x} e^{-\kappa_0 b} dx = \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} \frac{\kappa_0}{2\kappa_0} e^{-2\kappa_0 b} e^{-2\kappa_0 x} \Big|_b^{\infty} = - \frac{1}{2} W_0 e^{-4\kappa_0 b}. \end{aligned}$$

Складывая, получаем

$$H_{11} = I_1 + I_2 + I_3 = -W_0 = E_0. \quad (3.67)$$

Аналогично можно получить $H_{22} = H_{11} = -W_0 = E_0$. Как видим, диагональные матричные элементы гамильтониана H_{ii} , т. е. средние энергии частицы в состояниях $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ не зависят от расстояния между ямами и совпадают с H_{0ii} , т. е. с собственными энергиями E_0 гамильтониана H_0 (при $b \rightarrow \infty$).

Заметим, что в интегралах, входящих в выражение (3.66), мы пренебрегли их частями по областям вблизи точек b и $-b$ размерами $2a$ (где $a \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow \infty$)

внутри ям, поскольку эти части содержат сумму кинетической и потенциальной энергий, которые обе стремятся к бесконечности при $a \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow \infty$, но их сумма конечна и равна полной энергии E_0 , так что интегралы по этим областям равны $2a\kappa_0 E_0 \rightarrow 0$.

Далее вычисляем $H_{12} = H_{21}$. Аналогично имеем три интеграла по трем областям:

$$H_{12} = H_{21} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^*(x) H \psi_1(x) dx \equiv M_1 + M_2 + M_3 \equiv$$

$$\equiv \int_{-\infty}^{-b} \psi_2^*(x) H \psi_1(x) dx + \int_{-b}^b \psi_2^*(x) H \psi_1(x) dx + \int_b^{\infty} \psi_2^*(x) H \psi_1(x) dx. \quad (3.68)$$

$$M_1 = - \int_{-\infty}^{-b} \kappa_0 e^{\kappa_0 x} e^{-\kappa_0 b} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{\kappa_0 x} e^{\kappa_0 b} dx = - \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} \frac{\kappa_0}{2\kappa_0} e^{2\kappa_0 x} \Big|_{-\infty}^{-b} = - \frac{1}{2} W_0 e^{-2\kappa_0 b},$$

$$M_2 = - \int_{-b}^b \kappa_0 e^{\kappa_0 x} e^{-\kappa_0 b} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\kappa_0 x} e^{-\kappa_0 b} dx = - \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} 2b\kappa_0 e^{-2\kappa_0 b} = -W_0 2b\kappa_0 e^{-2\kappa_0 b}, \quad (3.69)$$

$$M_3 = - \int_{-b}^b \kappa_0 e^{-\kappa_0 x} e^{\kappa_0 b} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\kappa_0 x} e^{-\kappa_0 b} dx = \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} \frac{\kappa_0}{2\kappa_0} e^{-2\kappa_0 x} \Big|_b^{\infty} = - \frac{1}{2} W_0 e^{-2\kappa_0 b}.$$

Складывая, получаем

$$H_{12} = M_1 + M_2 + M_3 = -W_0 e^{-2\kappa_0 b} (1 + 2b\kappa_0) = E_0 Q = H_{21}. \quad (3.70)$$

Видим, что недиагональный матричный элемент пропорционален перекрытию волновых функций, т. е. амплитуде вероятности перехода частицы из одной ямы в другую.

В результате систему (3.59) можно переписать в виде

$$c_1 (E_0 - E) + c_2 E_0 Q = 0,$$

$$c_1 E_0 Q + c_2 (E_0 - E) = 0 \quad (3.71)$$

или в матричном виде

$$\begin{pmatrix} E_0 - E & QE_0 \\ QE_0 & E_0 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (3.72)$$

Заметим, что выражение (3.72) можно тождественно представить как

$$\left[\begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & QE_0 \\ QE_0 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (3.73)$$

Это есть не что иное, как матричная запись уравнения Шредингера

$$(H_0 + V^{(p)})\psi = E\psi, \quad (3.74)$$

где $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$; Ψ_1 и Ψ_2 – собственные состояния оператора H_0 , описывающие состояния частицы в разных ямах, т. е.

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$H_0\Psi_{1,2} = E_0\Psi_{1,2}, \quad \Psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.75)$$

Здесь $V^{(p)}$ – оператор возмущения, который вызывает переходы из одной ямы в другую, т. е. из одного состояния в другое (перемешивает состояния Ψ_1 и Ψ_2):

$$V^{(p)} = \begin{pmatrix} 0 & QE_0 \\ QE_0 & 0 \end{pmatrix} = QE_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$QE_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = QE_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.76)$$

т. е. $V^{(p)}\Psi_1 = QE_0\Psi_2$, так что $\langle\Psi_2|V^{(p)}|\Psi_1\rangle \equiv V_{12}^{(p)} = H_{12} = QE_0$. Этот оператор и включил в себя неортогональность волновых функций.

Условие разрешимости системы уравнений (3.71) или (3.72) имеет вид

$$(E_0 - E)^2 - Q^2 E_0^2 = 0. \quad (3.77)$$

Откуда следует

$$E^{(1,2)} - E_0 = \pm QE_0. \quad (3.78)$$

В результате будем иметь два новых значения энергии частицы, т. е. расщепление вырожденного уровня на два:

$$E^{(1,2)} = E_0 \pm QE_0 \approx E_0 \pm 2\kappa_0 b e^{-2\kappa_0 b} E_0. \quad (3.79)$$

Причем, как видим, величина расщепления определяется матричным элементом перехода частицы из первой во вторую яму (и наоборот), пропорциональным амплитуде вероятности найти частицу из первой ямы в связанном состоянии во второй яме:

$$\Delta E = E^{(2)} - E^{(1)} = -2QE_0 = 2QW_0 \approx 4\kappa_0 b e^{-2\kappa_0 b} W_0. \quad (3.80)$$

Таким образом, из формулы (3.79) следует, что энергия системы из двух ям и одной частицы (такого рода систему, например, представляет электрон в поле двух протонов – молекулярный ион водорода) зависит от расстояния между ямами. Между ямами возникает добавочное притяжение или отталкивание (в зависимости от того, увеличивается или уменьшается энергия системы при уменьшении расстояния между ними) за счет обмена частицей, которая туннелирует между ямами, т. е. проходит под потенциальным барьером в области, которая

недоступна в классической физике (такова природа химической связи в молекулярном ионе водорода H_2^+).

Первое из уравнений (3.71),

$$c_1(E_0 - E) + c_2 E_0 Q = 0,$$

с учетом равенства (3.78) дает

$$\frac{c_1^{(1,2)}}{c_2^{(1,2)}} = \frac{E_0 Q}{E^{(1,2)} - E_0} = \pm 1. \quad (3.81)$$

Таким образом, новым собственным значениям энергии $E^{(1)}$ и $E^{(2)}$ отвечают симметричная и антисимметричная (четная и нечетная) комбинации начальных функций ψ_1 и ψ_2 (рис. 3.5) в качестве новых собственных функций оператора Гамильтона:

$$\psi^{(1)}(x) = \frac{\psi_1 + \psi_2}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{\kappa_0}{2}} \left(e^{-\kappa_0|x+b|} + e^{-\kappa_0|x-b|} \right), \quad E^{(1)} = E_0 + E_0 Q = E_0 - W_0 Q, \quad (3.82)$$

$$\psi^{(2)}(x) = \frac{\psi_1 - \psi_2}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{\kappa_0}{2}} \left(e^{-\kappa_0|x+b|} - e^{-\kappa_0|x-b|} \right), \quad E^{(2)} = E_0 - E_0 Q = E_0 + W_0 Q. \quad (3.83)$$

Как видим, энергия нечетного состояния (3.83) выше энергии четного (3.82). Как и ранее (см. рис. 3.2), волновая функция основного (четного) состояния не имеет узлов, у волновой функции следующего (нечетного) состояния имеется один узел (см. рис. 3.5).

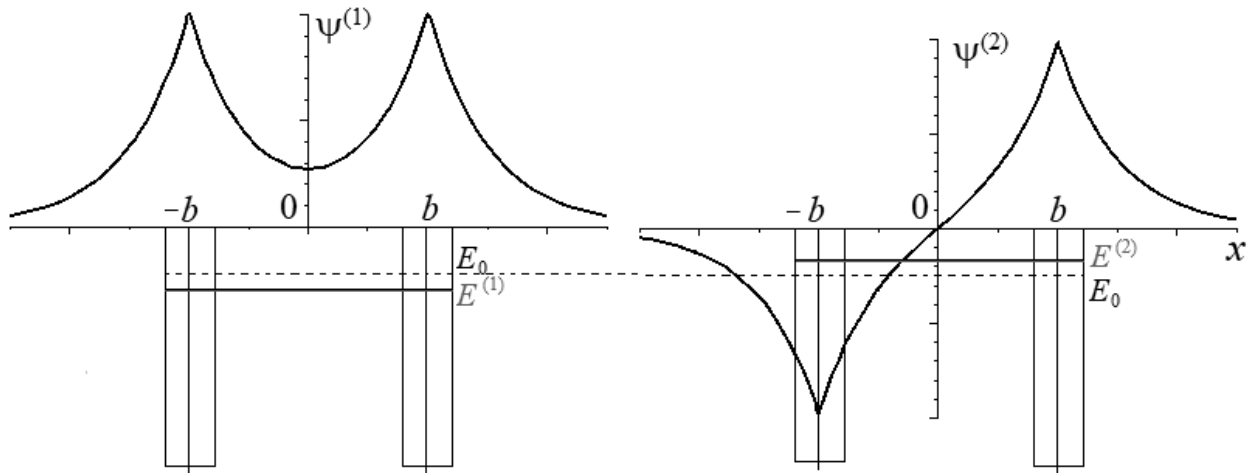


Рис 3.5. Четная $\psi^{(1)}$ и нечетная $\psi^{(2)}$ волновые функции частицы в потенциале двух мелких ям, отвечающие расщепленным энергиям $E^{(1)}$, $E^{(2)}$

3.5. Осцилляции вероятности найти частицу в заданной яме

Зададимся вопросом, что произойдет, если до момента $t = 0$ ямы были отделены непроницаемой перегородкой, а частица находилась слева (т. е. в состоянии $\psi^{(1)}$), а в момент $t = 0$ перегородку удалили.

Итак, до момента $t = 0$ частица находилась в состоянии

$$\Psi_1(x, t) = \psi_1(x)e^{-i\omega_0 t}, \quad (3.84)$$

где $\hbar\omega_0 = E_0$ – энергия этого состояния. При $t = 0$, складывая выражения (3.82) и (3.83), для волновой функции (3.84) получаем

$$\Psi_1(x, 0) = \psi_1(x) = \frac{\psi^{(1)}(x) + \psi^{(2)}(x)}{\sqrt{2}}. \quad (3.85)$$

После момента $t = 0$ состояние частицы уже не будет обладать определенной энергией, поскольку входящие в суперпозицию (3.65) состояния имеют разные энергии $E^{(1)} = \hbar\omega^{(1)}$ и $E^{(2)} = \hbar\omega^{(2)}$, так что дальнейшая эволюция этого состояния при $t > 0$ будет определяться волновой функцией

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi^{(1)}(x)e^{-i\omega^{(1)}t} + \psi^{(2)}(x)e^{-i\omega^{(2)}t} \right). \quad (3.86)$$

Вспоминая, что функции $\psi^{(1)}$ и $\psi^{(2)}$ соответственно равны

$$\psi^{(1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2), \quad \psi^{(2)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 - \psi_2)$$

и подставляя их в выражение (3.86), будем иметь

$$\begin{aligned} \Psi_1(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi^{(1)}e^{-i\omega^{(1)}t} + \psi^{(2)}e^{-i\omega^{(2)}t} \right) = \frac{1}{2} \left[(\psi_1 + \psi_2)e^{-i\omega^{(1)}t} + (\psi_1 - \psi_2)e^{-i\omega^{(2)}t} \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left[\psi_1 \left(e^{-i\omega^{(1)}t} + e^{-i\omega^{(2)}t} \right) + \psi_2 \left(e^{-i\omega^{(1)}t} - e^{-i\omega^{(2)}t} \right) \right] = \psi_1 e^{-i\omega_0 t} \cos \Delta\omega t - \psi_2 e^{-i\omega_0 t} i \sin \Delta\omega t, \end{aligned}$$

где $\Delta\omega = [\omega^{(2)} - \omega^{(1)}] / 2 = [E^{(2)} - E^{(1)}] / 2\hbar$, $\omega_0 = [\omega^{(2)} + \omega^{(1)}] / 2 = E_0 / \hbar$.

Таким образом, вероятность найти частицу в первой яме (т. е. в состоянии $\psi^{(1)}$) равна

$$W_1 = \cos^2 \Delta\omega t = \frac{1}{2}(1 + \cos 2\Delta\omega t), \quad (3.87)$$

во второй яме (в состоянии $\psi^{(2)}$) –

$$W_2 = \sin^2 \Delta\omega t = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\Delta\omega t). \quad (3.88)$$

То есть вероятность обнаружить частицу в какой-либо из ям осциллирует с частотой, которая определяется разностью энергии интерферирующих симметричного и антисимметричного состояний. Частица периодически переходит из одной ямы в другую и обратно. Частота этих осцилляций определяется расстоянием между энергиями в состояниях $\psi^{(1)}$ и $\psi^{(2)}$:

$$2\Delta\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = -\frac{2QE_0}{\hbar} = \frac{2QW_0}{\hbar} \approx \frac{4\kappa_0 b e^{-2\kappa_0 b} W_0}{\hbar}. \quad (3.89)$$

Точно такую же природу имеет, например, прецессия спина частицы в магнитном поле. У частицы со спином $\frac{1}{2}$ в магнитном поле (вдоль которого обычно направляют ось z) как раз имеются два состояния с разными энергиями, когда спин направлен по и против поля. А состояние со спином, направленным перпендикулярно полю, например по оси x , есть суперпозиция состояний спина по и против поля с разными энергиями. Прецессия спина вокруг магнитного поля и есть периодическое изменение его направления, т. е. переход из состояния спина по оси x в состояние против этой оси. Таким же образом в физике элементарных частиц описываются осцилляции квантового числа – странности (у K_0 -мезонов), нейтрон-антинейтронные, нейтринные осцилляции и т. д.

Обратим внимание на очень важное обстоятельство. При совпадении энергий уровней даже очень слабое воздействие на систему приводит к радикальной перестройке уровней: они полностью перемешиваются и расталкиваются (происходит расщепление). Это может приводить к фазовым переходам. Физика двухуровневых систем имеет широкое применение. Она описывает, например, природу химической связи и ядерных сил, дифракцию частиц в кристаллах и многое другое.

Глава 4. Формализм квантовой механики

Итак, в квантовой механике любая система (например, частиц) описывается волновой функцией, а эволюция системы во времени – уравнением Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_0 \psi, \quad (4.1)$$

где H_0 – оператор Гамильтона системы (он совпадает с оператором энергии, если не зависит от времени). Именно этим оператором и определяются законы развития системы во времени. В координатном представлении волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t)$ есть амплитуда вероятности найти частицы системы в момент t в точках с координатами $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots$, а квадрат ее модуля $|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t)|^2 d^3r_1 d^3r_2 \dots$ – вероятность найти частицы системы вблизи точек $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots$, в элементах объема $d^3r_1 d^3r_2 \dots$, так что $|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t)|^2$ – плотность вероятности, и

$$\int |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots)|^2 d^3r_1 d^3r_2 \dots = 1, \quad (4.2)$$

есть условие нормировки волновой функции.

В случае, когда оператор H_0 не зависит явно от времени, его собственные функции и его собственные значения определяют стационарные состояния системы с заданными энергиями:

$$H_0 \psi_n = E_n \psi_n. \quad (4.3)$$

Напомним, что действие оператора Гамильтона на собственную функцию сводится к умножению этой функции на энергию состояния. Эти энергии образуют спектр либо непрерывный при $E > 0$, либо дискретный при $E < 0$.

Эволюция таких состояний во времени описывается уравнением (4.1), которое приобретает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = E_n \psi_n, \quad (4.4)$$

так что

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \equiv \psi_n(\mathbf{r}) e^{-i \omega_n t}. \quad (4.5)$$

Эти состояния системы с заданными энергиями называются *стационарными*, поскольку величина $|\psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t)|^2$, которая определяет физически наблюдаемые вероятности событий, от времени не зависит.

4.1. Векторы состояний в квантовой механике

Главным свойством собственных функций $\psi_n(\mathbf{r})$ оператора H_0 является то, что они образуют полную систему линейно независимых ортонормированных функций (базис в пространстве функций, или векторов состояний), т. е. любую

волновую функцию (вектор состояния) можно представить в виде линейной суперпозиции базисных векторов:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(\mathbf{r}). \quad (4.6)$$

Собственные функции $\psi_n(\mathbf{r})$ являются аналогами единичных перпендикулярных (ортогональных) друг другу базисных векторов (ортов) $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ в обычном трехмерном пространстве, так что любой вектор $\mathbf{A}$ можно представить как

$$\mathbf{A} = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z = \sum_{i=1}^3 A_i \mathbf{e}_i, \quad (4.7)$$

где A_i – проекции вектора $\mathbf{A}$ на базисные направления $\mathbf{e}_i$. Это пространство называется *линейным*, поскольку для любых двух векторов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$, являющихся его элементами, любая их линейная комбинация $c_1 \mathbf{A} + c_2 \mathbf{B}$, где c_1 и c_2 – произвольные вещественные числа, также является элементом этого пространства.

Базисные векторы (орты) $\mathbf{e}_i$ обладают следующими свойствами: они являются единичными, т. е. длина каждого равна единице $|\mathbf{e}_i| = 1$, и ортогональны друг другу, т. е. скалярные произведения $(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) = 0$ при $i \neq j$ и $(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i) = |\mathbf{e}_i|^2 = 1$. Эти свойства, называемые *ортонормированностью системы базисных векторов*, можно объединить:

$$(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}. \quad (4.8)$$

Нетрудно видеть, что проекция вектора $\mathbf{A}$ на $\mathbf{e}_j$ равна скалярному произведению $A_j = (\mathbf{A} \mathbf{e}_j)$. Действительно,

$$(\mathbf{A} \mathbf{e}_j) = \sum_i A_i (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) = \sum_i A_i \delta_{ij}.$$

По этой причине любой вектор в трехмерном пространстве можно представить тройкой его проекций (компонент) на базисные направления:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + A_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + A_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv A_1 \mathbf{e}_1 + A_2 \mathbf{e}_2 + A_3 \mathbf{e}_3. \quad (4.9)$$

Норма (длина, или модуль) вектора определяется как

$$|\mathbf{A}| = \sqrt{\mathbf{A}^2} = \sqrt{(\mathbf{A} \mathbf{A})}, \quad (4.10)$$

где

$$\mathbf{A}^2 = (\mathbf{A} \mathbf{A}) = \sum_{i,j} A_i A_j (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) = \sum_{i=1}^3 A_i^2 = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2, \quad (4.11)$$

что есть не что иное, как теорема Пифагора.

Аналогично скалярное произведение двух разных векторов равно

$$(\mathbf{AB}) = \sum_{i,j} A_i B_j (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) = \sum_{i=1}^3 A_i B_i = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z. \quad (4.12)$$

В равенствах (4.11, 4.12) использовано условие ортонормированности (4.8). Заметим, что значения компонент вектора зависят от выбора системы координат (т. е. от ориентации тройки векторов $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$).

В квантовой механике благодаря принципу суперпозиции волновые функции также образуют линейное пространство. Только векторы в нем в общем случае комплексны и в суперпозиции входят комплексные числа, так что скалярные произведения определяются как

$$(\mathbf{AB}) = A_x^* B_x + A_y^* B_y + A_z^* B_z = A_1^* B_1 + A_2^* B_2 + A_3^* B_3 = \sum_{i=1}^3 A_i^* B_i. \quad (4.13)$$

Заметим, что при этом $(\mathbf{AB}) = (\mathbf{BA})^*$.

Скалярные произведения можно записывать по-разному. Мы в основном будем использовать обозначения Дирака, в которых скалярное произведение записывается при помощи скобок Дирака в виде произведения векторов бра, обозначаемых $\langle \mathbf{A} |$, и кэт, обозначаемых $| \mathbf{B} \rangle$ (от англ. bracket):

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle = \sum_{i=1}^3 A_i^* B_i, \quad \text{где } \langle \mathbf{A} | = (| \mathbf{A} \rangle)^\dagger. \quad (4.14)$$

Крестом в выражениях (4.14) обозначен так называемый *эрмитово-* (или *эрмитовски*) *сопряженный вектор*. Эрмитово сопряжение для векторов (и матриц) означает комплексное сопряжение и транспонирование, т. е. если

$$| \mathbf{A} \rangle = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}, \quad \text{то } \langle \mathbf{A} | = (| \mathbf{A} \rangle)^\dagger = \overline{\begin{pmatrix} A_1^* & A_2^* & A_3^* \end{pmatrix}}, \quad (4.15)$$

и тогда по правилам умножения матриц («строка на столбец») получаем

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle = \overline{\begin{pmatrix} A_1^* & A_2^* & A_3^* \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix} = A_1^* B_1 + A_2^* B_2 + A_3^* B_3 = \sum_{i=1}^3 A_i^* B_i. \quad (4.16)$$

Возвращаемся к квантовой механике. Собственные функции $\psi_n(\mathbf{r})$ оператора H_0 образуют полную систему ортонормированных функций (систему базисных векторов в некотором многомерном векторном пространстве, элементами которого являются волновые функции). Это означает, что любую волновую функцию, описывающую некоторое состояние системы, можно разложить по этим базисным функциям:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(\mathbf{r}).$$

А теперь перепишем это выражение в следующем абстрактном виде, отвлекаясь от конкретной зависимости функций от координат:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |n\rangle, \quad (4.17)$$

где $|\psi\rangle$ – вектор состояния; $|n\rangle$ – собственные векторы оператора Гамильтона:

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (4.18)$$

В принципе, собственные векторы можно обозначить и как $|\psi_n\rangle$, но наше обозначение короче и, как увидим далее, имеет определенный смысл. Собственные векторы образуют ортонормированную систему, т. е. в наших обозначениях

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}. \quad (4.19)$$

Умножая выражение (4.17) слева на $\langle n' |$ и используя равенство (4.19), имеем

$$\langle n' | \psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \langle n' | n \rangle = c_{n'},$$

так что для коэффициентов разложения c_n получаем

$$c_n = \langle n | \psi \rangle. \quad (4.20)$$

Теперь осталось определить скалярное произведение.

Рассмотрим два разных состояния системы A и B , описываемых векторами:

$$|A\rangle \equiv |\psi_A\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i |i\rangle, \quad |B\rangle \equiv |\psi_B\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} b_k |k\rangle, \quad (4.21)$$

эрмитово-сопряженный вектор состояния B будет равен

$$(|B\rangle)^\dagger = \langle B| \equiv \langle \psi_B| = \sum_{k=1}^{\infty} b_k^* \langle k|, \quad (4.22)$$

так что для скалярного произведения имеем

$$\langle B | A \rangle = \sum_{i,k} b_k^* a_i \langle k | i \rangle = \sum_k b_k^* a_k \equiv \sum_i b_i^* a_i. \quad (4.23)$$

Видим, что, как и ранее, $\langle B | A \rangle = \langle A | B \rangle^*$.

В квантовой механике, как мы уже отмечали, для возможности вероятностной интерпретации вектора состояний (волновые функции) должны быть нормированными, т. е.

$$\langle B|B\rangle = \langle A|A\rangle = \sum_k b_k^* b_k = \sum_k |b_k|^2 = \sum_i |a_i|^2 = 1. \quad (4.24)$$

Это соотношение позволяет нам интерпретировать a_i как амплитуду вероятности системе в состоянии $|A\rangle$ иметь энергию E_i (т. е. найти систему в состоянии $|i\rangle$). Точно так же b_i имеет смысл амплитуды вероятности системе в состоянии $|B\rangle$ иметь энергию E_i (т. е. находиться в состоянии $|i\rangle$). Величины $|a_i|^2$ и $|b_i|^2$ имеют смысл соответствующих вероятностей.

Количество собственных векторов состояний, которые формируют векторное пространство квантовых состояний (волновых функций), в общем случае бесконечно, т. е. такое пространство бесконечно-мерно. Оно называется *гильбертовым*. Но в некоторых физических ситуациях оно может иметь и конечную размерность (как, например, в двухуровневой задаче).

Выше мы использовали координатное представление (зависимость от координат) для волновых функций $\psi(\mathbf{r})$, кроме того, мы их нормировали следующим образом:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 r = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3 r = 1. \quad (4.25)$$

Это значит, что полная вероятность найти частицу во всем объеме равна 1.

Выражение (4.25) фактически определяет скалярное произведение в координатном представлении.

Соотношение ортонормированности (4.19) собственных векторов в координатном представлении запишется как

$$\langle n | n' \rangle \equiv \langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{n'}(\mathbf{r}) d^3 r = \delta_{nn'}. \quad (4.26)$$

Вернемся к разложению (4.17) вектора состояния по собственным функциям оператора Гамильтона:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle. \quad (4.27)$$

В этом случае состояние $|\psi\rangle$ характеризуется набором c_i , т. е. проекциями вектора состояния $|\psi\rangle$ на орты $|i\rangle$, которые имеют смысл амплитуд вероятностей системе иметь энергии E_i , т. е. быть в состоянии $|i\rangle$. Таким образом, величины $c_i \equiv c(E_i)$ представляют собой волновую функцию того же состояния, но зависящую не от координат, а от энергий (как говорят, в энергетическом представлении), причем, см. равенство (4.20),

$$c_i = \langle i | \psi \rangle = \int_V \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (4.28)$$

В скалярном произведении $\langle i | \psi \rangle$ символ i называется *индексом представления*, а ψ – *индексом состояния*. Тем самым подчеркивается, что $\langle i | \psi \rangle$ есть волновая функция в i -представлении (т. е. в энергетическом).

Заметим, что волновую функцию в координатном представлении можно аналогично записать как $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$. Это будет отражать разложение вектора состояния $|\psi\rangle$ по собственным состояниям оператора координаты $|\mathbf{r}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \int d^3r \langle \mathbf{r} | \psi \rangle |\mathbf{r}\rangle. \quad (4.29)$$

Здесь в силу непрерывности координаты суммирование заменено на интегрирование. Умножая обе части уравнения (4.29) слева на $\langle \mathbf{r}' |$, получим

$$\langle \mathbf{r}' | \psi \rangle = \int d^3r \langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int d^3r \langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (4.30)$$

Здесь, чтобы равенство (4.30) выполнялось, должно выполняться

$$\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \quad (4.31)$$

а это, с одной стороны, аналог условия ортонормированности собственных состояний непрерывного спектра оператора координаты, а с другой – это и есть собственное состояние оператора координаты в координатном представлении, т. е.

$$\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (4.32)$$

В этом состоянии $|\mathbf{r}\rangle$ координата частицы равна $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ точно так же, как в состоянии $|n\rangle$ энергия частицы равна $E = E_n$. Таким образом, условие ортонормированности собственных функций оператора координаты (4.31) в координатном представлении будет выглядеть следующим образом:

$$\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \int d^3r'' \psi_{\mathbf{r}'}^*(\mathbf{r}'') \psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}'') = \int d^3r'' \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (4.33)$$

Заметим, что наши функции $\psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}')$ не являются нормируемыми в обычном смысле, поскольку

$$\int d^3r'' |\psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}'')|^2 = \infty.$$

Это общее свойство состояний $\psi_{F'}$, имеющих определенные значения (F') физической величины F , соответствующей оператору с непрерывным спектром. Такие состояния не могут быть точно осуществлены. Практически можно лишь добиться того, чтобы система находилась в состоянии, в котором значения F лежат достаточно близко к F' . Таким образом, состояния, относящиеся к строго заданному собственному значению в непрерывном спектре, являются математической идеализацией. Эта идеализация весьма полезна, так как она значительно упрощает вычисления, однако в некоторых случаях (например, в строгой теории рассеяния) приходится от такой идеализации отказываться.

Возможно, что ненормируемость собственных функций $\psi_{F'}(\mathbf{r})$ операторов, имеющих непрерывный спектр,

$$\int d^3r |\psi_F(\mathbf{r})|^2 = \infty, \quad (4.34)$$

связана с неосуществимостью соответствующих состояний. Практически можно осуществить только состояния, в которых значение F лежит в некотором интервале от F до $F + \Delta F$. Такие состояния описываются, например, волновыми пакетами типа (2.8), которые можно нормировать (см. рис. 2.2).

4.2. Операторы физических величин. Эрмитовы операторы

Подобно тому, как функция есть рецепт, позволяющий по данному числу x найти другое число $y = f(x)$, так оператор есть рецепт, позволяющий по заданному вектору состояния вычислить другой вектор. Таким образом, действие оператора на вектор состояния сводится к преобразованию этого вектора в новый вектор:

$$\hat{F}|\psi\rangle = |\psi'\rangle. \quad (4.35)$$

Чтобы при таком преобразовании не нарушался принцип суперпозиции состояний, необходимо выполнение условий

$$\hat{F}a|\psi\rangle = a\hat{F}|\psi\rangle, \quad \hat{F}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \hat{F}|\psi_1\rangle + \hat{F}|\psi_2\rangle. \quad (4.36)$$

Операторы, удовлетворяющие этим условиям для произвольных векторов, называются *линейными операторами*.

Если оператор $\hat{F}$ соответствует физической величине F , то его среднее значение должно быть вещественно. Условие вещественности средних значений сводится к интегральному равенству для оператора $\hat{F}$:

$$\overline{F} = \langle \hat{F} \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau = \int \psi \hat{F}^* \psi^* d\tau \equiv \langle \psi | \hat{F} \psi \rangle = \langle \hat{F} \psi | \psi \rangle. \quad (4.37)$$

В обозначениях Дирака среднее значение величины F записывается следующим образом:

$$\overline{F} = \langle \hat{F} \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau \equiv \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \left(\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \right)^*. \quad (4.38)$$

Такие операторы называются *самосопряженными*, или *эрмитовыми*.

4.2.1. Эрмитовы операторы

Оператор $\hat{A}^\dagger$ называется эрмитово-сопряженным к оператору $\hat{A}$, если для любых ψ_1, ψ_2 выполняется

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 d\tau = \int (\hat{A}^\dagger \psi_1)^* \psi_2 d\tau \equiv \left(\int \psi_2^* \hat{A}^\dagger \psi_1 d\tau \right)^*, \quad (4.39)$$

т. е.

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger \psi_1 \rangle^*. \quad (4.40)$$

Если $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, такой оператор называется *эрмитовым*, или *самосопряженным*.

Как и средние, собственные значения эрмитовых операторов вещественны, поскольку они совпадают со средними значениями в собственных состояниях. Действительно, если

$$\hat{A} \psi_\lambda = a_\lambda \psi_\lambda, \text{ то } \int \psi_\lambda^* \hat{A} \psi_\lambda d\tau = a_\lambda = \int (A \psi_\lambda)^* \psi_\lambda d\tau = a_\lambda^*.$$

Таким образом, все операторы физических величин должны быть эрмитовыми.

В обозначениях Дирака определение эрмитово-сопряженного оператора (4.40) записывается следующим образом:

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle^*, \quad (4.41)$$

а условие эрмитовости (или самосопряженности) оператора –

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle^*, \quad (4.42)$$

откуда автоматически вытекает вещественность средних

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^*. \quad (4.43)$$

Величина $\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$ называется *матричным элементом оператора* между состояниями ψ_1 и ψ_2 , а $\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_1 \rangle$ – *диагональным матричным элементом*.

Произведением двух операторов $\hat{F}\hat{K}$ называется оператор, действующий на функцию последовательно сначала оператором $\hat{K}$, затем $\hat{F}$. В общем случае произведение операторов зависит от порядка сомножителей: $\hat{F}\hat{K}\psi \neq \hat{K}\hat{F}\psi$. Если $\hat{F}\hat{K}\psi = \hat{K}\hat{F}\psi$, то говорят, что эти операторы коммутируют друг с другом.

4.2.2. Эрмитово сопряжение оператора произведения $\hat{F}\hat{K}$

По определению,

$$\int \psi_1^* \hat{F}\hat{K} \psi_2 d\tau = \int (\hat{F}^\dagger \psi_1)^* \hat{K} \psi_2 d\tau = \int (\hat{K}^\dagger \hat{F}^\dagger \psi_1)^* \psi_2 d\tau = \int ((\hat{F}\hat{K})^\dagger \psi_1)^* \psi_2 d\tau.$$

Таким образом,

$$(\hat{F}\hat{K})^\dagger = \hat{K}^\dagger \hat{F}^\dagger. \quad (4.44)$$

Если операторы $\hat{F}$ и $\hat{K}$ являются эрмитовыми, то

$$(\hat{F}\hat{K})^\dagger = \hat{K}^\dagger \hat{F}^\dagger = \hat{K}\hat{F}. \quad (4.45)$$

Следовательно, произведение эрмитовых операторов также эрмитов оператор, только если они коммутируют, т. е. если их коммутатор равен нулю:

$$[\hat{F}, \hat{K}] \equiv \hat{F}\hat{K} - \hat{K}\hat{F} = 0. \quad (4.46)$$

В общем случае, если $\hat{F}$ и $\hat{K}$ являются линейными эрмитовыми операторами, то такими же будут и операторы

$$\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{K}\hat{F} + \hat{F}\hat{K}) \equiv \frac{1}{2}\{\hat{K}, \hat{F}\} \quad (4.47)$$

и

$$\hat{G} = i(\hat{K}\hat{F} - \hat{F}\hat{K}) \equiv i[\hat{K}, \hat{F}], \quad (4.48)$$

где оператор $\{\hat{K}, \hat{F}\} = \hat{K}\hat{F} + \hat{F}\hat{K}$ называется *антикоммутатором*, а $[\hat{K}, \hat{F}] = \hat{K}\hat{F} - \hat{F}\hat{K}$, как мы уже отметили, – *коммутатором* этих операторов. Если $\hat{G} = 0$, $\hat{S} = \hat{K}\hat{F}$.

4.3. Свойства собственных функций эрмитовых операторов

1. *Взаимная ортогональность.* Собственные функции (векторы состояний), отвечающие разным собственным значениям эрмитова оператора, взаимно ортогональны.

Действительно, рассмотрим два собственных состояния $|\psi_\mu\rangle$ и $|\psi_\lambda\rangle$ оператора $\hat{A}$, отвечающие двум собственным значениям этого оператора:

$$\hat{A}|\psi_\mu\rangle = a_\mu |\psi_\mu\rangle, \quad \hat{A}|\psi_\lambda\rangle = a_\lambda |\psi_\lambda\rangle.$$

Умножая, например, первое из этих уравнений на $\langle \psi_\lambda |$ слева, получим

$$\langle \psi_\lambda | \hat{A} | \psi_\mu \rangle = a_\mu \langle \psi_\lambda | \psi_\mu \rangle = \langle \psi_\mu | \hat{A} | \psi_\lambda \rangle^* = a_\lambda \langle \psi_\mu | \psi_\lambda \rangle^* = a_\lambda \langle \psi_\lambda | \psi_\mu \rangle \quad (4.49)$$

или

$$(a_\mu - a_\lambda) \langle \psi_\lambda | \psi_\mu \rangle = 0. \quad (4.50)$$

В случае отсутствия, как говорят, вырождения, т. е. при $a_\mu \neq a_\lambda$, имеем

$$\langle \psi_\lambda | \psi_\mu \rangle = 0. \quad (4.51)$$

При наличии вырождения в качестве собственных функций всегда можно выбрать такие их суперпозиции, которые взаимно ортогональны, и в результате также получить ортонормированную систему функций $\langle \psi_\lambda | \psi_\mu \rangle = \delta_{\lambda\mu}$. Покажем это на примере двукратного вырождения. Это означает, что имеются две нормированные собственные функции $\psi_{\mu 1}$ и $\psi_{\mu 2}$ оператора $\hat{A}$, соответствующие собственному значению a_μ . Заметим, что любая их суперпозиция также является собственной функцией оператора $\hat{A}$ (в силу его линейности) с тем же собственным значением.

Теперь определим две другие функции:

$$\phi_1 = \psi_{\mu 1}, \quad \phi_2 = b(\psi_{\mu 1} + \varepsilon \psi_{\mu 2}), \quad (4.52)$$

где b и ε – комплексные числа. Выберем ε так, чтобы $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0$, т. е.

$$1 + \varepsilon \langle \psi_{\mu 2} | \psi_{\mu 1} \rangle = 0. \quad (4.53)$$

Откуда находим

$$\varepsilon = -\langle \psi_{\mu 2} | \psi_{\mu 1} \rangle^{-1}, \quad (4.54)$$

а величина b найдется из условия нормировки. Таким образом, получаем ортонормированный набор собственных функций и при наличии вырождения.

2. *Полнота.* Собственные функции (состояния) эрмитова оператора образуют *полную* ортонормированную систему (базис в пространстве функций). Это означает, что любую функцию $f(\mathbf{r})$ можно разложить по этим функциям. Действительно,

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} c_{\mu} \psi_{\mu}(\mathbf{r}), \quad c_{\mu} = \int d^3 r' \psi_{\mu}^*(\mathbf{r}') f(\mathbf{r}') \equiv \langle \psi_{\mu} | f \rangle. \quad (4.55)$$

Если функция $f(\mathbf{r})$ нормирована, то из условия ее нормировки

$$\langle f | f \rangle = \int f^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) d^3 r = 1$$

следует

$$\sum_{\mu, \nu} c_{\mu}^* c_{\nu} \int \psi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \psi_{\nu}(\mathbf{r}) d^3 r' = \sum_{\mu} c_{\mu}^* c_{\mu} = \sum_{\mu} |c_{\mu}|^2 = 1. \quad (4.56)$$

Это условие полноты системы собственных функций, так как оно служит критерием того, что эта система достаточна, чтобы с ее помощью представить любую другую функцию. С другой стороны, оно позволяет интерпретировать c_{μ} как амплитуду вероятности в состоянии $f(\mathbf{r})$ обнаружить систему в состоянии $|\psi_{\mu}\rangle$, в котором физическая величина A имеет значение a_{μ} , причем в силу равенства (4.56) c_{μ} представляют все возможные состояния системы.

3. *Формула Дирака.* Перепишем выражения (4.55) в виде

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} \int d^3 r' \psi_{\mu}^*(\mathbf{r}') f(\mathbf{r}') \psi_{\mu}(\mathbf{r}) = \int d^3 r' f(\mathbf{r}') \sum_{\mu} \psi_{\mu}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mu}(\mathbf{r}), \quad (4.57)$$

откуда следует

$$\sum_{\mu} \psi_{\mu}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mu}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (4.58)$$

В обозначениях Дирака то же самое запишется (уже безотносительно к какому-либо конкретному представлению) как

$$|f\rangle = \sum_{\mu} c_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle = \sum_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle \langle \psi_{\mu} | f \rangle. \quad (4.59)$$

Из равенства (4.59) следует, что оператор $\sum_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle \langle \psi_{\mu}|$ является единичным, т. е.

$$\sum_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle \langle \psi_{\mu}| = 1. \quad (4.60)$$

Это соотношение носит название *формулы Дирака*.

4.4. Операторы проецирования и представления волновой функции

В этом разделе попытаемся более строго определить, что такое представление волновой функции и как перейти от одного представления к другому.

Итак, пусть некоторая физическая величина μ имеет дискретный спектр собственных значений μ_n , т. е.

$$\hat{\mu} |\mu_n\rangle = \mu_n |\mu_n\rangle, \quad (4.61)$$

тогда формула Дирака (4.60) перепишется в виде

$$\sum_n |\mu_n\rangle \langle \mu_n| = 1. \quad (4.62)$$

Оператор проецирования (проекционный оператор, или проектор) P_{μ_n} произвольного вектора состояния на некоторое собственное состояние $|\mu_n\rangle$ представляет собой следующую конструкцию из векторов бра и кэт:

$$P_{\mu_n} = |\mu_n\rangle\langle\mu_n|. \quad (4.63)$$

Его действие на любой вектор состояния $|a\rangle$ определяется следующим образом:

$$P_{\mu_n} |a\rangle = |\mu_n\rangle\langle\mu_n|a\rangle, \quad (4.64)$$

т. е., действительно, оператор P_{μ_n} проецирует вектор $|a\rangle$ на направление базисного вектора $|\mu_n\rangle$, причем величина этой проекции $\langle\mu_n|a\rangle$ есть амплитуда вероятности того, что в состоянии $|a\rangle$ величина μ имеет значение μ_n .

Аналогично и для бра-вектора $\langle a|$:

$$\langle a|P_{\mu_n} = \langle a|\mu_n\rangle\langle\mu_n|. \quad (4.65)$$

Основным свойством проекционных операторов P_{μ} является

$$P_{\mu_n}^2 = P_{\mu_n}. \quad (4.66)$$

Действительно, из определения (4.63) и условия нормировки имеем

$$P_{\mu_n}^2 = |\mu_n\rangle\langle\mu_n|\mu_n\rangle\langle\mu_n| = |\mu_n\rangle\langle\mu_n| = P_{\mu_n}.$$

Операторы проецирования удовлетворяют соотношению Дирака

$$\sum_n P_{\mu_n} = \sum_n |\mu_n\rangle\langle\mu_n| = 1. \quad (4.67)$$

Умножая эту формулу справа на $|a\rangle$, получаем разложение этого вектора по собственным состояниям $|\mu_n\rangle$:

$$|a\rangle = \sum_n |\mu_n\rangle\langle\mu_n|a\rangle.$$

Из нормировки вектора $|a\rangle$, т. е. из $\langle a|a\rangle = 1$, следует

$$\sum_n \langle a|\mu_n\rangle\langle\mu_n|a\rangle = \sum_n |\langle\mu_n|a\rangle|^2 = 1,$$

что есть условие полноты системы собственных функций (векторов) $|\mu_n\rangle$ оператора $\hat{\mu}$. Величина $\langle\mu_n|a\rangle$ представляет собой амплитуду вероятности системе в состоянии $|a\rangle$ иметь величину μ , равную μ_n . Таким образом, $\langle\mu_n|a\rangle$ есть не что иное, как *волновая функция* системы в μ -представлении. Поэтому вполне естественно (как мы уже отметили) называть a индексом состояния, а μ_n – индексом представления. Величина $|\langle\mu_n|a\rangle|^2$ есть вероятность того, что в состоянии $|a\rangle$ величина $\mu = \mu_n$.

Умножая формулу Дирака слева на $\langle\lambda_i|$, а справа – сначала на $|a\rangle$, затем на $|\lambda_k\rangle$, где $|\lambda_k\rangle$ – собственные векторы другого оператора $\hat{\lambda}$, отвечающего

другой физической величине λ (также имеющей дискретный спектр), соответственно, получим сначала

$$\langle \lambda_i | a \rangle = \sum_n \langle \lambda_i | \mu_n \rangle \langle \mu_n | a \rangle, \quad (4.68)$$

что представляет собой связь между волновыми функциями в разных представлениях (с другой стороны, это принцип суперпозиции), и затем

$$\langle \lambda_i | \lambda_k \rangle = \sum_n \langle \lambda_i | \mu_n \rangle \langle \mu_n | \lambda_k \rangle = \delta_{ik}, \quad (4.69)$$

которое есть соотношение ортогональности и нормировки. Таким образом, формула Дирака полностью эквивалентна этим соотношениям и выражает их в наиболее сжатом и общем виде.

Замечание. Если индекс представления λ пробегает непрерывные значения, т. е. величина λ имеет сплошной спектр, то в этом случае амплитуда $\langle \lambda | a \rangle$ будет функцией непрерывной переменной, т. е. волновой функцией состояния $|a\rangle$ в λ -представлении. В этом случае $|\langle \lambda | a \rangle|^2$ есть плотность вероятности, а $dW = |\langle \lambda | a \rangle|^2 d\lambda$ – вероятность системе в состоянии $|a\rangle$ иметь величину λ , лежащую в пределах от λ до $\lambda + d\lambda$. Суммирование необходимо заменить на интегрирование, так что формула Дирака (4.62) будет иметь вид (см. также соотношение (4.29))

$$\int |\lambda\rangle \langle \lambda| d\lambda = 1. \quad (4.70)$$

4.5. Переход от одного представления к другому. Унитарные операторы

Вернемся к формуле (4.68), записав ее в виде

$$\langle \lambda_i | a \rangle = \sum_n \langle \mu_n | a \rangle \langle \lambda_i | \mu_n \rangle. \quad (4.71)$$

Это аналог разложения (4.55) волновой функции в координатном представлении (т. е. зависящей от координат) по собственным функциям некоторого оператора (также в координатном представлении). Действительно, равенство (4.71) можно переписать в терминах волновых функций:

$$\psi_a(\lambda) = \sum_n \langle \mu_n | a \rangle \psi_n(\lambda), \quad (4.72)$$

где $\psi_n(\lambda)$ – собственная функция оператора $\hat{\mu}$ в λ -представлении, т. е. это есть разложение волновой функции, которая описывает состояние a в некотором представлении λ , по собственным функциям оператора $\hat{\mu}$, также в представлении λ . Коэффициенты разложения $\langle \mu_n | a \rangle$ представляют собой амплитуды вероятности системе в состоянии $|a\rangle$ иметь величину μ , равные μ_n , т. е. волновую функцию $\psi_a(\mu)$ в μ -представлении.

С другой стороны, можно сказать, что соотношения (4.68) или (4.71) связывают распределение по λ в состоянии $|a\rangle$ с распределением по μ в том же состоянии $|a\rangle$. Другими словами, равенство (4.68) представляет собой преобразование волновых функций (или векторов состояний) при переходе от μ -представления, выражаемого амплитудами $\langle\mu_n|a\rangle$, к λ -представлению, выражаемому $\langle\lambda_i|a\rangle$ (это преобразование аналогично преобразованию компонент вектора при повороте системы координат, т. е. базисных векторов в обычном трехмерном пространстве).

Это преобразование осуществляют скалярные произведения собственных функций $\langle\lambda_i|\mu_n\rangle$ операторов $\hat{\mu}$ и $\hat{\lambda}$ (т. е. амплитуды найти в состоянии с определенным значением $\mu = \mu_n$, значение $\lambda = \lambda_i$). Они образуют матрицу

$$U_{in} = \langle\lambda_i|\mu_n\rangle, \quad (4.73)$$

так что соотношение (4.68) принимает вид

$$\langle\lambda_i|a\rangle = \sum_n \langle\lambda_i|\mu_n\rangle \langle\mu_n|a\rangle = \sum_n U_{in} \langle\mu_n|a\rangle. \quad (4.74)$$

Свойства этой матрицы получаются умножением формулы Дирака слева на $\langle\lambda_i|$, а справа на $|\lambda_k\rangle$:

$$\langle\lambda_i|\lambda_k\rangle = \sum_n \langle\lambda_i|\mu_n\rangle \langle\mu_n|\lambda_k\rangle = \sum_n U_{in} U_{kn}^* = \delta_{ik}. \quad (4.75)$$

Обратное преобразование от λ -представления к μ -представлению осуществляется обратной матрицей U_{in}^{-1} , оно также получается при помощи формулы Дирака и выглядит следующим образом:

$$\langle\mu_i|a\rangle = \sum_n \langle\mu_i|\lambda_n\rangle \langle\lambda_n|a\rangle = \sum_n U_{ni}^* \langle\lambda_n|a\rangle \equiv \sum_n U_{in}^{-1} \langle\lambda_n|a\rangle, \quad (4.76)$$

откуда следует

$$U_{in}^{-1} = U_{ni}^* \equiv U_{in}^\dagger, \quad (4.77)$$

где мы ввели эрмитово-сопряженную матрицу $U_{in}^\dagger$, которая получается из матрицы U_{in} комплексным сопряжением и транспонированием. Она обладает свойством, см. равенство (4.75),

$$\sum_n U_{in} U_{kn}^* = \sum_n U_{in} U_{nk}^{-1} \equiv \sum_n U_{in} U_{nk}^\dagger = \delta_{ik}. \quad (4.78)$$

Таким образом, матрица U_{in} преобразования вектора состояния из одного представления в другое есть конкретная реализация некоторого оператора U , который, действуя на вектор состояния в одном представлении, переводит его в другое представление (т. е. один набор компонент вектора переводит в другой набор). Вводя матричные элементы операторов U , U^{-1} и $U^\dagger$, формулу (4.77) можем переписать так:

$$(U^{-1})_{in} = \langle \mu_i | \lambda_n \rangle = \langle \lambda_n | \mu_i \rangle^* = U_{ni}^* \equiv (U^\dagger)_{in}. \quad (4.79)$$

В операторном виде

$$U^{-1} = U^\dagger \text{ или } U^\dagger U = 1. \quad (4.80)$$

Эти соотношения эквивалентны (4.78).

Матрицы (и операторы), обладающие таким свойством, называются *унитарными*. Главное их свойство – при преобразованиях они сохраняют нормировку (длины векторов не меняются).

Действительно, вспоминая, что мы определили скалярное произведение как произведение эрмитово-сопряженного вектора бра на вектор кэт (т. е. произведение «строка на столбец»), и учитывая, что $(U|a\rangle)^\dagger = \langle a|U^\dagger$, см. выражение (4.44), получим

$$(U|a\rangle)^\dagger U|a\rangle = \langle a|U^\dagger U|a\rangle = \langle a|a\rangle. \quad (4.81)$$

Такое преобразование эквивалентно повороту базисных векторов в гильбертовом пространстве. При этом проекции векторов состояний на эти базисные векторы меняются, сами же векторы и их длины (суммы квадратов модулей их компонент) в новых координатах остаются неизменными.

4.6. Матричное представление операторов

Итак, физические величины в квантовой механике описываются эрмитовыми операторами, которые действуют на векторы состояний и имеют вещественные собственные значения. Их собственные функции образуют полные системы. Наблюдаемые величины – это средние от операторов в конкретных состояниях, они вещественны:

$$\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle^* = \bar{T} \equiv \langle T \rangle. \quad (4.82)$$

Разложим вектор состояния $|\psi\rangle$ по собственным векторам $|i\rangle$ некоторого эрмитова оператора, имеющего дискретный спектр. Пусть для конкретности это будет оператор Гамильтона. В этом случае состояниям $|i\rangle$ отвечают энергии E_i :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c_i |i\rangle, \quad c_i = \langle i | \psi \rangle, \quad (4.83)$$

при этом

$$\langle \psi | = \sum_{k=1}^{\infty} c_k^* \langle k |. \quad (4.84)$$

Из вещественности средней величины (4.82) имеем

$$\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle^* = \sum_{i,k} c_k^* c_i \langle k | \hat{T} | i \rangle = \sum_{i,k} c_k c_i^* \langle k | \hat{T} | i \rangle^*. \quad (4.85)$$

Здесь набор матричных элементов $\langle i|\hat{T}|k\rangle \equiv T_{ik}$ представляет собой матрицу оператора $\hat{T}$ в энергетическом представлении, поскольку $|i\rangle$ и $|k\rangle$ – собственные функции оператора энергии.

С другой стороны,

$$\sum_{i,k} c_k^* c_i \langle k|\hat{T}|i\rangle \equiv \sum_{i,k} c_i^* c_k \langle i|\hat{T}|k\rangle,$$

поскольку по индексам i и k проводится суммирование, их можно поменять местами (такие индексы называются *немыми*). Также

$$\sum_{i,k} c_k c_i^* \langle k|\hat{T}|i\rangle^* \equiv \sum_{i,k} c_i^* c_k \langle k|\hat{T}|i\rangle^*.$$

В результате получаем

$$\langle \psi|\hat{T}|\psi\rangle = \sum_{i,k} c_i^* c_k \langle i|\hat{T}|k\rangle = \sum_{i,k} c_i^* c_k \langle k|\hat{T}|i\rangle^* \equiv \sum_{i,k} c_i^* c_k \langle i|\hat{T}^\dagger|k\rangle, \quad (4.86)$$

откуда следует, что оператор $\hat{T}$ и его матрица T_{ik} эрмитовы, т. е. $T_{ik} = T_{ik}^\dagger = T_{ki}^*$ или $\langle i|\hat{T}^\dagger|k\rangle = \langle i|\hat{T}|k\rangle = \langle k|\hat{T}|i\rangle^*$.

Таким образом, мы убедились, что, действительно, матрица эрмитово-сопряженного оператора $\hat{T}^\dagger$ является транспонированной и комплексно-сопряженной матрицей оператора $\hat{T}$: $T^\dagger = T^*$.

4.7. Действие оператора на вектор состояния в матричном представлении

Рассмотрим действие оператора $\hat{T}$ на некоторый вектор состояния, которое переводит его в другой вектор состояния:

$$\hat{T}|\psi\rangle = |\psi'\rangle, \quad (4.87)$$

разложим оба вектора по собственным состояниям, например оператора Гамильтона:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_k |k\rangle, \quad |\psi'\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c'_i |i\rangle,$$

так что выражение (4.86) превращается в

$$\sum_{i=1}^{\infty} c'_i |i\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \hat{T} |k\rangle. \quad (4.88)$$

Умножая слева на $\langle n|$, получаем

$$c'_n = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \langle n|\hat{T}|k\rangle \equiv \sum_k T_{nk} c_k, \quad (4.89)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$, что выражает действие оператора на вектор состояния в энергетическом представлении. Причем векторы состояния (начальный и конечный) представляются столбцами из компонент c_n и c'_n , а оператор – матрицей T_{nk} . Первый индекс – n – нумерует строки матрицы, второй – k – ее столбцы.

Пример. Для вектора состояния, состоящего из трех компонент, выражение (4.89) запишется так:

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ c'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}, \quad (4.90)$$

что в этом случае эквивалентно записи (4.89) в виде

$$\begin{aligned} c'_1 &= T_{11}c_1 + T_{12}c_2 + T_{13}c_3, \\ c'_2 &= T_{21}c_1 + T_{22}c_2 + T_{23}c_3, \\ c'_3 &= T_{31}c_1 + T_{32}c_2 + T_{33}c_3. \end{aligned} \quad (4.91)$$

Здесь использовано обычное правило умножения матрицы на вектор «строка на столбец», т. е. каждая строка матрицы умножается на столбец вектора. Точно так же умножаются и матрицы друг на друга.

Действительно, рассмотрим произведение двух операторов $\hat{G} = \hat{F}\hat{K}$. Используя формулу Дирака, получаем

$$\langle i | \hat{G} | k \rangle = \langle i | \hat{F}\hat{K} | k \rangle \equiv \sum_l \langle i | \hat{F} | l \rangle \langle l | \hat{K} | k \rangle, \quad (4.92)$$

т. е.

$$(FK)_{ik} = \sum_l F_{il} K_{lk}, \quad (4.93)$$

что и есть правило умножения матриц «строка на столбец», только здесь имеются в виду строки и столбцы матриц.

Эрмитово-сопряженная матрица, входящая в запись (4.90), имеет вид

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} T_{11}^* & T_{21}^* & T_{31}^* \\ T_{12}^* & T_{22}^* & T_{32}^* \\ T_{13}^* & T_{23}^* & T_{33}^* \end{pmatrix}, \quad (4.94)$$

а ее эрмитовость означает равенство матрицы T ее комплексно-сопряженной и транспонированной T^{*T} :

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11}^* & T_{21}^* & T_{31}^* \\ T_{12}^* & T_{22}^* & T_{32}^* \\ T_{13}^* & T_{23}^* & T_{33}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{21} & T_{31} \\ T_{21} & T_{22} & T_{32} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix}. \quad (4.95)$$

Заметим, что выражение (4.86) для среднего можно переписать следующим образом:

$$\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = \sum_{i,k} c_k c_i^* \langle i | \hat{T} | k \rangle = \sum_{i,k} \rho_{ki} T_{ik} = \sum_k (\rho T)_{kk} \equiv \text{Sp}(\rho T), \quad (4.96)$$

где мы ввели новую матрицу

$$\rho_{ik} = c_i c_k^*, \quad (4.97)$$

называемую *матрицей плотности чистого состояния*, а также новое понятие – *след матрицы* (Sp или Tr), которое означает сумму ее диагональных элементов:

$$\text{Sp } M \equiv \text{Tr } M = \sum_i M_{ii}. \quad (4.98)$$

4.8. Свойства унитарных преобразований

Сначала выясним, как преобразуются матричные элементы операторов при переходе от μ - к λ -представлению, т. е. при таком унитарном преобразовании. Опять, используя формулу Дирака, имеем

$$\langle \lambda_i | F | \lambda_k \rangle = \sum_{n,n'} \langle \lambda_i | \mu_n \rangle \langle \mu_n | F | \mu_{n'} \rangle \langle \mu_{n'} | \lambda_k \rangle. \quad (4.99)$$

Вспоминая формулы (4.73, 4.79), $U_{in} = \langle \lambda_i | \mu_n \rangle$, $(U^{-1})_{in} = \langle \mu_i | \lambda_n \rangle$, перепишем равенство (4.99) в виде

$$\langle \lambda_i | F | \lambda_k \rangle = \sum_{n,n'} U_{in} \langle \mu_n | F | \mu_{n'} \rangle U_{nk}^{-1}. \quad (4.100)$$

Пусть F' – матрица в λ -представлении, а F – в μ -представлении, тогда равенство (4.100) принимает вид

$$F' = U F U^{-1}. \quad (4.101)$$

Из равенства (4.99) вытекает очень важное свойство такого унитарного преобразования: оно оставляет инвариантным след матрицы, т. е.

$$\text{Sp } F' = \text{Sp } F. \quad (4.102)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \sum_i \langle \lambda_i | F | \lambda_i \rangle &= \sum_{i,n,n'} \langle \lambda_i | \mu_n \rangle \langle \mu_n | F | \mu_{n'} \rangle \langle \mu_{n'} | \lambda_i \rangle = \\ &= \sum_{n,n'} \langle \mu_n | F | \mu_{n'} \rangle \delta_{nn'} = \sum_n \langle \mu_n | F | \mu_n \rangle. \end{aligned}$$

Заметим, что преобразование базисных векторов (т. е. выбор в качестве базиса другого полного набора ортогональных векторов пространства), например поворот осей координат, приводит в новом базисе к изменению координат всех векторов, образующих пространство, кроме базисных. Такое преобразование эквивалентно обратному преобразованию (т. е. повороту в противоположную

сторону) всех векторов пространства относительно базисных, которые остаются неизменными. При этом компоненты векторов изменяются совершенно одинаково.

Рассмотрим теперь преобразование, переводящее один нормированный вектор состояния $|a\rangle$ в другой нормированный вектор $|b\rangle$ при помощи некоторого линейного оператора D («шляпки» над операторами будем опускать там, где это не вызывает недоразумений), т. е.

$$|b\rangle = D|a\rangle. \quad (4.103)$$

Эрмитово-сопряженное соотношение –

$$\langle b| = \langle a| D^\dagger. \quad (4.104)$$

Поскольку векторы состояний должны быть нормированы, то

$$\langle b|b\rangle = \langle a|a\rangle = \langle a|D^\dagger D|a\rangle,$$

и, следовательно,

$$D^\dagger D = DD^\dagger = 1, \quad (4.105)$$

т. е. такой оператор преобразования вектора состояния с сохранением его длины должен быть унитарным.

Умножая соотношение (4.104) справа на D , получим $\langle b|D = \langle a|$. Таким образом, оператор D преобразует векторы кэт $|a\rangle$ в $|b\rangle$, а векторы бра – обратно $\langle b|$ в $\langle a|$. К таким преобразованиям, изменяющим координаты всех векторов пространства, в частности, относятся сдвиг и поворот системы координат (или сдвиг и поворот самого вектора) в обычном трехмерном пространстве.

Спрашивается, а как изменяются операторы физических величин при таких унитарных преобразованиях. Рассмотрим действие какого-либо такого оператора F на вектор состояния $|a\rangle$. При преобразовании D вектор состояния $|a\rangle$ переходит в $D|a\rangle$, а вектор $F|a\rangle$, соответственно, в $DF|a\rangle$.

Определим преобразованный оператор F' соотношением

$$DF|a\rangle \equiv DFD^{-1}D|a\rangle \equiv F'D|a\rangle, \quad (4.106)$$

так что

$$F' = DFD^{-1}. \quad (4.107)$$

Точно так же преобразуются и матрицы операторов при переходе от одного представления (т. е. базиса) к другому (см. равенство (4.101)).

4.9. Одновременная измеримость величин и коммутаторы

Если волновая функция некоторого состояния системы совпадает с собственной функцией оператора $\hat{F}$, то в этом состоянии физическая величина F имеет определенное значение. Также если волновая функция является одновременно собственной функцией нескольких операторов, то в этом состоянии име-

ют определенные значения все физические величины, соответствующие этим операторам.

Например, в состоянии свободного движения, которое описывается функцией $A \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, определенные значения имеют импульс $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и кинетическая энергия $p^2/2m$, так как эта функция одновременно является собственной функцией как оператора импульса, так и оператора кинетической энергии.

Однако в этом состоянии не имеют определенного значения квадрат момента количества движения и его проекции на оси координат, так как плоская волна не является собственной функцией соответствующих операторов. Далее мы увидим, что возможны и такие состояния свободного движения, в которых одновременно имеют определенное значение кинетическая энергия, квадрат углового момента и одна из его проекций. Однако при этом импульс частицы не имеет определенного значения.

Эти особенности физических величин, отражающие закономерности атомных явлений, должны проявляться в свойствах операторов квантовой механики.

Теорема 1. Если две физические величины F и M одновременно могут иметь определенные значения (т. е. могут быть одновременно измеримы), то их операторы должны коммутировать.

Утверждение о том, что физические величины F_n и M_n имеют определенные значения в одном состоянии, означает, что функция ψ_n является собственной функцией операторов $\hat{F}$ и $\hat{M}$, т. е.

$$\begin{aligned}\hat{F}|\psi_n\rangle &= F_n|\psi_n\rangle, \\ \hat{M}|\psi_n\rangle &= M_n|\psi_n\rangle.\end{aligned}\tag{4.108}$$

Умножим первое из этих уравнений слева на $\hat{M}$, а второе – на $\hat{F}$ и вычтем из первого уравнения второе:

$$(\hat{M}\hat{F} - \hat{F}\hat{M})|\psi_n\rangle = (FM_{nn} - M_nF_n)|\psi_n\rangle = 0.\tag{4.109}$$

То есть, действительно, если волновая функция является собственной для двух операторов, то эти операторы должны коммутировать.

Теорема 2. Можно доказать и обратную теорему: если два оператора $\hat{M}$ и $\hat{F}$ коммутируют, то они имеют общую систему собственных функций.

Рассмотрим случай, когда оба оператора имеют систему невырожденных собственных значений. Итак, имеем

$$(\hat{M}\hat{F} - \hat{F}\hat{M}) = 0,\tag{4.110}$$

и пусть ψ_n образуют полную систему собственных функций оператора $\hat{M}$ с собственными значениями M_n , т. е.

$$\hat{M}\psi_n = M_n\psi_n.\tag{4.111}$$

Действуя слева на это соотношение оператором $\hat{F}$ и используя их коммутативность, находим

$$\hat{M}(\hat{F}\psi_n) = M_n(\hat{F}\psi_n), \quad (4.112)$$

т. е. $\hat{F}\psi_n$ является собственной функцией оператора $\hat{M}$, соответствующей тому же собственному значению M_n . А поскольку собственные значения оператора $\hat{M}$ не вырождены, то функция $\hat{F}\psi_n$ может отличаться от собственной функции этого оператора ψ_n только числовым множителем. Если обозначить этот множитель через F_n , то получим

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n. \quad (4.113)$$

Следовательно, функции ψ_n являются собственными функциями и оператора $\hat{F}$.

При наличии вырождения собственные функции ψ_{nk} оператора, например $\hat{M}$, вообще говоря, могут не быть собственными коммутирующего с ним оператора $\hat{F}$. Однако и в этом случае из них можно составить такие комбинации, которые будут собственными функциями оператора $\hat{F}$.

Действительно, пусть, например, собственное состояние оператора $\hat{M}$, соответствующее собственному значению M_n , дважды вырождено, т. е. ему отвечают две функции ψ_{n1} и ψ_{n2} :

$$\hat{M}(c_1\psi_{n1} + c_2\psi_{n2}) = M_n(c_1\psi_{n1} + c_2\psi_{n2}). \quad (4.114)$$

Опять действуя слева на это соотношение оператором $\hat{F}$, находим

$$\hat{M}\hat{F}(c_1\psi_{n1} + c_2\psi_{n2}) = M_n\hat{F}(c_1\psi_{n1} + c_2\psi_{n2}). \quad (4.115)$$

Теперь найдем комбинации функций ψ_{n1} и ψ_{n2} , которые являются собственными функциями оператора $\hat{F}$:

$$\hat{F}(c_1|\psi_{n1}\rangle + c_2|\psi_{n2}\rangle) = F(c_1|\psi_{n1}\rangle + c_2|\psi_{n2}\rangle). \quad (4.116)$$

Умножая выражение (4.116) слева последовательно сначала на $\langle\psi_{n1}|$, потом на $\langle\psi_{n2}|$, а также используя их ортонормированность, получаем систему двух однородных линейных уравнений для определения коэффициентов c_1 , c_2 и соответствующих собственных значений F_1 и F_2 :

$$\begin{aligned} c_1(\langle\psi_{n1}|\hat{F}|\psi_{n1}\rangle - F) + c_2\langle\psi_{n1}|\hat{F}|\psi_{n2}\rangle &= 0, \\ c_1\langle\psi_{n2}|\hat{F}|\psi_{n1}\rangle + c_2(\langle\psi_{n2}|\hat{F}|\psi_{n2}\rangle - F) &= 0 \end{aligned} \quad (4.117)$$

или в матричном виде

$$\begin{pmatrix} F_{11} - F & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} - F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (4.118)$$

Условие разрешимости этой системы уравнений – равенство детерминанта нулю –

$$(F_{11} - F)(F_{22} - F) - |F_{12}|^2 = 0 \quad (4.119)$$

дает два собственных значения $F^{(1,2)}$ и два отношения c_1/c_2 :

$$\frac{c_1^{(1,2)}}{c_2^{(1,2)}} = \frac{F_{12}}{F^{(1,2)} - F_{11}}, \quad (4.120)$$

которые и определяют две комбинации функций ψ_{n1} и ψ_{n2} , являющиеся собственными функциями оператора $\hat{F}$. Сами величины c_1 и c_2 определяются из условия нормировки.

Таким образом, в квантовой механике состояние системы определяется полным набором значений независимых физических величин, операторы которых взаимно коммутируют. Такие полные наборы могут быть разными.

4.10. Коммутаторы и соотношения неопределенностей

Мы отметили, что две физические величины не могут иметь одновременно определенные значения ни в одном состоянии, если их операторы не коммутируют.

Знание перестановочных соотношений между двумя некоммутирующими операторами позволяет определить важное неравенство, которому должны удовлетворять средние квадратичные отклонения этих величин от своих средних значений. Идея вывода неравенства принадлежит Герману Вейлю (1928).

Определим дисперсию величины A (среднее квадратичное отклонение от ее среднего значения) как обычно:

$$\Delta A = \sqrt{(A - \langle A \rangle)^2}, \quad \langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (4.121)$$

Пусть эрмитовы операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют, причем

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}, \quad (4.122)$$

где $\hat{C}$ – также эрмитов оператор (см. выражение (4.48)). Для простоты будем считать $\langle A \rangle = \langle B \rangle = 0$, т. е. $(\Delta A)^2 \equiv \Delta A^2 = A^2$, $(\Delta B)^2 \equiv \Delta B^2 = B^2$.

Рассмотрим состояние

$$|\Phi\rangle = (\alpha\hat{A} + i\hat{B})|\psi\rangle. \quad (4.123)$$

Очевидно, что

$$J(\alpha) \equiv \langle \Phi | \Phi \rangle = \langle \psi | (\alpha \hat{A} - i\hat{B})(\alpha \hat{A} + i\hat{B}) | \psi \rangle \geq 0. \quad (4.124)$$

Раскрываем правую часть

$$\begin{aligned} J(\alpha) &= \langle \psi | \alpha^2 \hat{A}^2 + i\alpha (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + \hat{B}^2 | \psi \rangle = \alpha^2 \Delta A^2 - \alpha \langle C \rangle + \Delta B^2 \equiv \\ &\equiv \Delta A^2 \left(\alpha^2 - 2\alpha \frac{\langle C \rangle}{2\Delta A^2} + \frac{\langle C \rangle^2}{4\Delta A^4} + \frac{\Delta B^2}{\Delta A^2} - \frac{\langle C \rangle^2}{4\Delta A^4} \right) = \\ &= \Delta A^2 \left(\alpha - \frac{\langle C \rangle}{2\Delta A^2} \right)^2 + \Delta B^2 - \frac{\langle C \rangle^2}{4\Delta A^2} \geq 0. \end{aligned} \quad (4.125)$$

Чтобы неравенство (4.125) выполнялось при любом α , должно выполняться

$$\Delta B^2 - \frac{\langle C \rangle^2}{4\Delta A^2} \geq 0 \quad (4.126)$$

или

$$\Delta B^2 \Delta A^2 \geq \frac{\langle C \rangle^2}{4}, \quad (4.127)$$

откуда следует соотношение неопределенностей в виде

$$\Delta B \cdot \Delta A \geq \frac{\langle C \rangle}{2}. \quad (4.128)$$

Минимальная неопределенность достигается при $J(\alpha) = 0$ и

$$\alpha = \frac{\langle C \rangle}{2\Delta A^2}, \quad (4.129)$$

т. е. в состоянии ψ , удовлетворяющем уравнению $(\alpha \hat{A} + i\hat{B})|\psi\rangle = 0$ (см. равенство (4.123)), или

$$\left(\frac{\langle C \rangle}{2\Delta A^2} \hat{A} + i\hat{B} \right) |\psi\rangle = 0. \quad (4.130)$$

Пример. Пусть $\hat{A}$ – оператор координаты в координатном представлении, $\hat{B}$ – оператор импульса:

$$\hat{A} = x, \quad \hat{B} = \hat{p}_x = -i\hbar \nabla_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

Нетрудно видеть, что

$$\begin{aligned} [x, \hat{p}_x] \psi(x) &= (x\hat{p}_x - \hat{p}_x x) \psi(x) = \\ &= -i\hbar x \psi'(x) + i\hbar \psi(x) + i\hbar x \psi'(x) = i\hbar \psi(x), \end{aligned} \quad (4.131)$$

т. е. $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$, так что $\hat{C} = \hbar$, и в результате из соотношения (4.128) получаем известное соотношение неопределенностей Гейзенберга для координаты и импульса (Вернер Гейзенберг, 1927) –

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (4.132)$$

Уравнение (4.130) для состояния с минимальной неопределенностью в этом случае принимает вид

$$\left(\frac{\hbar x}{2\Delta x^2} + \hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\psi'(x)}{\psi(x)} = -\frac{x}{2\Delta x^2},$$

т. е.

$$\frac{d}{dx} \ln \psi = -\frac{x}{2\Delta x^2}. \quad (4.133)$$

Решение уравнения (4.133) очевидно и имеет вид

$$\psi(x) = K e^{-\frac{x^2}{4\Delta x^2}}, \quad (4.134)$$

где K – нормировочная константа. Это так называемый *гауссов волновой пакет*. Как мы увидим далее, такие волновые функции появляются в задаче о квантовом гармоническом осцилляторе.

4.11. Основные постулаты квантовой механики

Мы разобрали основные понятия квантовой механики и можем теперь сформулировать ее основные постулаты (Дж. фон Нейман (J. von Neumann)).

1. Состояния системы описываются ненулевыми векторами комплексного гильбертова пространства $\mathcal{H}$, причем векторы ψ и ψ' описывают одно и то же состояние тогда и только тогда, когда $\psi' = c\psi$, где c – произвольное комплексное число. Каждой наблюдаемой A однозначно сопоставляется линейный эрмитов оператор.

2. Наблюдаемые одновременно измеримы тогда и только тогда, когда соответствующие им эрмитовы операторы коммутируют. Результатом измерения наблюдаемой, представляемой оператором $\hat{A}$, может быть лишь одно из собственных значений a_n оператора $\hat{A}$. Вероятность w_n получить значение a_n при измерении в состоянии ψ равна

$$w_n = |c_n|^2 = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2, \quad (4.135)$$

где c_n – коэффициент в разложении Ψ по полной системе собственных функций оператора $\hat{A}$:

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n, \quad c_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle. \quad (4.136)$$

3. Эволюция системы описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi, \quad (4.137)$$

где H – оператор Гамильтона (гамильтониан системы).

4. Каждому вектору Ψ из пространства $\mathcal{H}$ отвечает некоторое состояние системы. Любой эрмитов оператор $\hat{A}$ соответствует некоторой наблюдаемой.

Замечание 1. Выбор пространства $\mathcal{H}$ и закона соответствия $A \rightarrow \hat{A}$ для конкретной физической системы определяется согласием предсказаний теории с результатами эксперимента. Этот выбор не может быть формализован: можно построить бесконечно много квантовых теорий, которые в пределе $\hbar \rightarrow 0$ переходят в одну и ту же классическую теорию.

Замечание 2. Существуют правила суперотбора, согласно которым пространство состояний $\mathcal{H}$ разбивается в прямую сумму ортогональных подпространств, причем сумма векторов из разных подпространств не может соответствовать физически реализуемому состоянию. Например, запрещена суперпозиция состояний с различными электрическими зарядами.

4.12. Простейшие операторы квантовой механики

Как мы отмечали, эволюция системы и ее состояния в квантовой механике определяются оператором Гамильтона, т. е. оператором полной энергии системы, которая есть сумма ее кинетической и потенциальной энергий и зависит от импульсов частиц системы (кинетическая энергия) и от их координат (потенциальная энергия). По этой причине операторы координат и импульсов являются в квантовой механике основными: через них выражается оператор Гамильтона и из них можно сконструировать практически все остальные наблюдаемые физические величины, кроме тех, которые являются существенно квантовыми, таких как, например, спин частицы.

Мы уже установили вид операторов координат и проекций импульса на эти координаты в координатном представлении (в декартовых координатах x, y, z). В таблице 4.1 представлены наиболее важные операторы нерелятивистской квантовой механики в координатном представлении. Однако операторы, сопоставляемые физическим наблюдаемым величинам в квантовой механике, можно задавать и независимо от конкретного представления. В наиболее общем виде это делается при помощи коммутационных (или перестановочных) соотношений. Для выяснения этих соотношений можно использовать и конкретный, уже известный нам, вид операторов в координатном представлении.

К примеру, из координатного представления естественно следует, что три оператора координаты x, y, z (для краткости x_i ($i = 1, 2, 3$)) коммутируют между собой, т. е.

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_k] = 0, \quad (4.138)$$

поскольку эти операторы сводятся к умножению на число, а числа в произведении можно переставлять.

Точно так же в силу коммутативности частных производных

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0, \quad i, k = 1, 2, 3. \quad (4.139)$$

Таблица 4.1

**Операторы координаты, импульса, момента импульса
и оператора Гамильтона в координатном представлении**

Физическая величина	Обозначение	Оператор
Координата	$\mathbf{r}$ x, y, z	$\mathbf{r}$ x, y, z
Импульс	$\mathbf{p}$ p_x, p_y, p_z	$-i\hbar\nabla$ $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \hbar\frac{\partial}{\partial y}, \hbar\frac{\partial}{\partial z}$
Момент количества движения (импульса), или угловой (вращательный) момент	$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$ $L_x = yp_z - zp_y,$ $L_y = zp_x - xp_z,$ $L_z = xp_y - yp_x$	$\mathbf{L} = -i\hbar[\mathbf{r} \times \nabla]$ $L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$ $L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),$ $L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$
Энергия (нерелятивистская)	$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$	$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})$

Аналогично выражению (4.131) для операторов импульса и координаты частицы получаются следующие соотношения:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_k] = \hat{x}_i \hat{p}_k - \hat{p}_k \hat{x}_i = i\hbar\delta_{ik}. \quad (4.140)$$

Используя явный вид операторов проекций вращательных (угловых) моментов L_i , можно показать, что должны выполняться перестановочные соотношения

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_k] = i\hbar \hat{L}_l, \quad (4.141)$$

где индексы i, k, l образуют циклическую перестановку, т. е. либо $i = 1, k = 2, l = 3$, либо $i = 2, k = 3, l = 1$, либо $i = 3, k = 1, l = 2$. Эти три перестановочных соотношения можно для краткости записать в виде векторного произведения

$$[\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}}] = i\hbar \hat{\mathbf{L}}. \quad (4.142)$$

Также можно показать, что

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (4.143)$$

Таким образом, из равенств (4.141) и (4.143) следует, что определенные значения могут иметь только одна из проекций углового момента и его квадрат. Исключение составляет только случай $\mathbf{L} = 0$, когда все три проекции равны нулю.

4.13. Эволюция средних значений наблюдаемых величин с течением времени

Рассмотрим произвольное состояние $|\psi\rangle$, эволюционирующее в соответствии с уравнением Шредингера (см., например, равенство (4.137)), которое мы запишем в виде

$$\frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H |\psi\rangle, \quad (4.144)$$

и, соответственно, эрмитово-сопряженное уравнение

$$\frac{\partial \langle\psi|}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \langle\psi| H. \quad (4.145)$$

Найдем уравнение, описывающее изменение среднего некоторой физической величины T в этом состоянии. Вычислим производную от такого среднего:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle\psi| \hat{T} |\psi\rangle &= \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \psi \right| \hat{T} |\psi\rangle + \langle\psi| \frac{\partial}{\partial t} \hat{T} |\psi\rangle + \langle\psi| \hat{T} \left| \frac{\partial}{\partial t} \psi \right\rangle = \\ &= \langle\psi| \frac{\partial}{\partial t} \hat{T} |\psi\rangle - \frac{1}{i\hbar} \langle\psi| H \hat{T} - \hat{T} H |\psi\rangle \equiv \frac{1}{i\hbar} \langle\psi| \frac{\partial}{\partial t} \hat{T} + [\hat{T}, H] |\psi\rangle. \end{aligned}$$

Как обычно, определим оператор $d\hat{T}/dt$ по правилу

$$\frac{d}{dt} \langle\psi| \hat{T} |\psi\rangle = \langle\psi| \frac{d\hat{T}}{dt} |\psi\rangle,$$

получаем

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{T}, H]. \quad (4.146)$$

Результатом равенства (4.146) является важный вывод: если оператор некоторой физической величины T явно не зависит от времени и коммутирует с оператором Гамильтона, то среднее значение T не изменяется с течением времени в любом состоянии. Такая величина называется *интегралом движения квантовых уравнений*.

4.14. Теорема Эренфеста

Для простоты вернемся к одномерному движению вдоль оси x . Импульс $p_x = p$ и координата x не зависят явно от времени, поэтому производные от операторов, соответствующих этим величинам, имеют вид

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, H], \quad \frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, H]. \quad (4.147)$$

Оператор Гамильтона равен

$$H = -\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x). \quad (4.148)$$

Вычисление оператора скорости с использованием коммутатора (4.140) дает

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, H] = \frac{1}{2im\hbar} [\hat{x}, \hat{p}^2] + \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, U(x)] = \\ &= \frac{1}{2im\hbar} (\hat{x}\hat{p}\hat{p} - \hat{p}\hat{p}\hat{x} + \hat{p}\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}\hat{p}) = \frac{1}{2im\hbar} [(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\hat{p} + \hat{p}(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})] = \frac{\hat{p}}{m}. \end{aligned}$$

Оператор производной от импульса легко вычислить в координатном представлении. Действительно, действуя этим оператором на функцию, получаем

$$\frac{d\hat{p}}{dt} \psi = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, U(x)] \psi = -\frac{\partial}{\partial x} \{U(x)\psi\} + U(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} U(x) \right\} \psi,$$

так что в результате имеем

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m}, \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x}. \quad (4.149)$$

Взяв производную по времени от обеих частей первого уравнения (4.149) и используя затем второе, находим, что оператор координаты удовлетворяет уравнению Ньютона:

$$m \frac{d^2 \hat{x}}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial x}. \quad (4.150)$$

Из равенств (4.149) следуют уравнения для средних (Пауль Эренфест [26], 1927):

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle, \quad (4.151)$$

которые являются квантовым аналогом канонических уравнений Гамильтона в классической механике. Из них следует квантовое обобщение закона Ньютона для средних величин

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = -\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle. \quad (4.152)$$

Уравнения (4.151, 4.152) отражают содержание теоремы Эренфеста.

Если волновая функция $\psi(x)$ отлична от нуля в небольшой области пространства около точки $\bar{x} = \langle x \rangle$, то последнее уравнение (4.152) допускает упрощение. Вводя новую переменную $\xi = x - \bar{x}$, можно в этом случае разложить производную $\partial U / \partial x$ в ряд вблизи $\bar{x}$:

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial^2 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2} \xi + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3} \xi^2 + \dots,$$

где мы обозначили производные как

$$\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}} \equiv \left. \frac{\partial U(\bar{x} + \xi)}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} \quad \text{и т. д.}$$

В результате, полагая $\xi \equiv \Delta x$ и учитывая, что при усреднении линейный по ξ (т. е. знакопеременный) член исчезает, получаем

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = -\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}} - \frac{1}{2} \frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3} \langle (\Delta x)^2 \rangle + \dots \quad (4.153)$$

Если выполняется условие

$$\left| \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}} \right| \gg \frac{1}{2} \left| \frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3} \langle (\Delta x)^2 \rangle \right|, \quad (4.154)$$

то вторым слагаемым в правой части уравнения (4.153) можно пренебречь, и квантовое уравнение сводится к классическому уравнению Ньютона для движения центра волнового пакета, если предположить, что в нем сосредоточена вся масса частицы. Неравенство выполняется тем лучше, чем более плавно изменяется потенциал при изменении x и чем меньше пространственная протяженность волнового пакета. Однако малые значения $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ в силу соотношения неопределенностей приводят к большим неопределенностям в значении импульса, т. е. к существенному нарушению классического понятия импульса и кинетической энергии частицы.

Для приближенной применимости классических представлений о движении частицы необходимо, чтобы приблизительно выполнялось равенство

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{\langle (\Delta p)^2 \rangle}{2m} \approx \frac{\langle p^2 \rangle}{2m},$$

т. е. должно выполняться неравенство

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \gg \frac{\langle (\Delta p)^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m \langle (\Delta x)^2 \rangle}. \quad (4.155)$$

Одновременное выполнение двух неравенств (4.154) и (4.155) возможно при движении частиц с большими импульсами в плавно меняющихся внешних полях.

4.15. Теорема о вириале

Предварительно докажем полезное соотношение

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} \quad (4.156)$$

и вспомним равенства (4.147, 4.149). Объединяя их, имеем

$$[H, \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \nabla U, \quad [H, \mathbf{r}] = -i\hbar \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}. \quad (4.157)$$

И еще, если $|n\rangle$ – стационарное состояние дискретного спектра энергий (финитное движение), то

$$\langle n | [H, \hat{A}] | n \rangle = \langle n | H\hat{A} | n \rangle - \langle n | \hat{A}H | n \rangle = (E_n - E_n) \langle n | \hat{A} | n \rangle = 0. \quad (4.158)$$

Откуда

$$\begin{aligned} \langle n | [H, \hat{\mathbf{p}}\mathbf{r}] | n \rangle &= \langle n | \hat{\mathbf{p}}[H, \mathbf{r}] | n \rangle + \langle n | [H, \hat{\mathbf{p}}]\mathbf{r} | n \rangle = \\ &= -i\hbar \left(\langle n | \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} | n \rangle - \langle n | \mathbf{r} \nabla U | n \rangle \right) = -i\hbar \left(\langle n | \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} - \mathbf{r} \nabla U | n \rangle \right) = 0. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$2 \langle n | \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} | n \rangle = \langle n | \mathbf{r} \nabla U | n \rangle. \quad (4.159)$$

Величина $\mathbf{r} \nabla U$ называется *вириалом* данной механической системы. Если потенциальная энергия пропорциональна r^k , то $\mathbf{r} \nabla U = kU$, так что

$$2 \langle T \rangle = k \langle U \rangle, \quad (4.160)$$

где T – кинетическая энергия частицы.

Соотношения (4.159, 4.160) можно назвать *квантовой вириальной теоремой*, так как они по форме совпадают с вириальной теоремой классической механики, определяющей соотношение между средними по времени значениями кинетической и потенциальной энергий системы.

Для гармонического осциллятора $k = 2$, поэтому

$$\langle T \rangle = \langle U \rangle = \frac{\langle E \rangle}{2}. \quad (4.161)$$

Для кулоновского и гравитационного потенциалов $k = -1$, поэтому

$$2\langle T \rangle = -\langle U \rangle = -2\langle E \rangle. \quad (4.162)$$

В частности, из этой теоремы следует что, если облако горячего газа, удерживаемое гравитационными силами, излучает, т. е. теряет свою полную энергию, его кинетическая энергия, а следовательно, и температура должны возрасть. Соответственно, отрицательная потенциальная энергия убывает, возрастая по абсолютной величине. То есть такое облако будет разогреваться и сжиматься до тех пор, пока (если позволит масса) не загорятся термоядерные реакции (т. е. образуется звезда).

4.16. Соотношение неопределенностей «время – энергия»

Вспомним, что если два оператора не коммутируют (см. равенство (4.122)):

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C},$$

то имеет место соотношение неопределенностей (4.127)

$$\Delta B^2 \Delta A^2 \geq \frac{\langle C \rangle^2}{4}.$$

Кроме того, мы показали, что эволюция операторов во времени определяется уравнением (4.146):

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, H].$$

Если оператор $\hat{A}$ явно не зависит от времени, то имеем

$$[\hat{A}, H] = i\hbar \frac{d\hat{A}}{dt} \quad (4.163)$$

и

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle \langle (\Delta A)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle^2. \quad (4.164)$$

Введем характерное время изменения наблюдаемой A :

$$\Delta t_A = \frac{\sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle}}{\left| \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle \right|}, \quad (4.165)$$

тогда получаем $\Delta E \Delta t_A \geq \hbar/2$, где $\Delta E \equiv \sqrt{\langle (\Delta E)^2 \rangle}$. Таким образом, получаем, что для любого состояния ψ справедливо

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (4.166)$$

где Δt – минимальное время, за которое заметно изменяется распределение хотя бы одной из наблюдаемых.

Если H не зависит явно от времени, то и неопределенность энергии ΔE в состоянии ψ от времени не зависит.

Дополнительная литература

1. Друкaрев Г. Ф. Квантовая механика. Ленинград: Изд-во ЛГУ, 1988. 200 с.
2. Фок В. А. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976. 376 с.
3. Сербо В. Г., Хриплович И. Б. Конспект лекций по квантовой механике. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1999. 138 с.
4. Давыдов А. С. Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1963. 748 с.
5. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). Т. 3. М.: Физматлит, 2004. 800 с.
6. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики. М.: Наука, 1979. 480 с.
7. Шифф Л. Квантовая механика. М.: ИЛ, 1959. 473 с.
8. Бом Д. Квантовая теория. М.: Наука, 1965. 728 с.
9. Борисов А. В. Основы квантовой механики. М.: Изд-во физ. ф-та МГУ, 1999. 89 с.
10. Фон Нейман И. Математические основы квантовой механики. М.: Наука, 1964. 367 с.

Глава 5. Симметрии в физике и законы сохранения

В 1918 г. немецкий математик Эмми Нётер [27] доказала очень важную для физики теорему, из которой следует, что все законы сохранения связаны с соответствующими симметриями природы.

5.1. Инвариантность гамильтониана и интегралы движения

Рассмотрим некоторый объект (или систему), который описывается волновой функцией ψ и гамильтонианом H . Гамильтониан определяет закон изменения волновой функции (эволюцию системы) во времени:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \quad (5.1)$$

Пусть волновая функция ψ подвергается унитарному преобразованию S ($S^\dagger S = 1$), в результате которого получается функция ψ^S :

$$\psi^S = S\psi, \quad (5.2)$$

причем

$$\langle \psi^S | \psi^S \rangle = \langle S\psi | S\psi \rangle \equiv \langle \psi | S^\dagger S \psi \rangle \equiv \langle \psi | S^\dagger S | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle. \quad (5.3)$$

Эта преобразованная функция ψ^S также удовлетворяет уравнению Шредингера, но с другим гамильтонианом. Действительно, подействуем на уравнение (5.1) слева оператором S . Получаем

$$i\hbar \frac{\partial S\psi}{\partial t} = SH \underbrace{S^{-1}S}_{=1} \psi. \quad (5.4)$$

Таким образом, функция ψ^S удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi^S}{\partial t} = H^S \psi^S. \quad (5.5)$$

Но оператор Гамильтона изменился:

$$H^S = SHS^{-1}, \quad (5.6)$$

т. е. в результате такого преобразования мы можем попасть в другой мир с другим законом эволюции системы (другими законами природы).

В силу унитарности ($S^\dagger S = 1$) оператор S можно представить в виде

$$S = e^{i\tau T}, \quad (5.7)$$

где T – эрмитов оператор ($T = T^\dagger$), называемый *генератором преобразования*, а τ – некоторый параметр, характеризующий преобразование. Действительно, в этом случае

$$S^\dagger = e^{-i\tau T^\dagger} = e^{-i\tau T} \quad (5.8)$$

и $S^\dagger S = SS^\dagger = 1$.

Тогда преобразованный оператор Гамильтона запишется как

$$H^S = e^{i\tau T} H e^{-i\tau T}. \quad (5.9)$$

Для бесконечно малого (называемого еще инфинитезимальным) преобразования ($\tau \ll 1$) имеем

$$S = 1 + i\tau T, \quad \psi^S = (1 + i\tau T)\psi \quad (5.10)$$

и

$$H^S = (1 + i\tau T) H (1 - i\tau T) = H + i\tau [T, H]. \quad (5.11)$$

Отсюда следует: чтобы гамильтониан был инвариантен относительно преобразования, порождаемого генератором T (чтобы преобразование, порождаемое этим оператором, не нарушало законов природы), T должен коммутировать с гамильтонианом, т. е.

$$[T, H] = 0, \quad \text{тогда} \quad H^S = H. \quad (5.12)$$

С другой стороны, скорость изменения среднего любой физической величины определяется также коммутатором оператора этой величины с гамильтонианом (см. равенство (4.146); мы считаем, что оператор T не зависит явно от времени), т. е.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [T, H]. \quad (5.13)$$

Если коммутатор равен нулю, то среднее величины $\langle T \rangle$ не зависит от времени, следовательно, T является интегралом движения.

Таким образом, любому унитарному преобразованию, относительно которого гамильтониан системы инвариантен, отвечает интеграл движения, т. е. сохраняющаяся величина, которая есть генератор преобразования.

5.2. Закон сохранения энергии

Сам гамильтониан можно считать генератором унитарного преобразования, представляющего сдвиг во времени. Действительно, уравнение Шредингера можно переписать так:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi(t + \tau) - \psi(t)}{\tau} = \frac{1}{i\hbar} H \psi \quad (5.14)$$

или

$$\psi^S(t) = S\psi(t) \equiv \psi(t + \tau) = \left(1 + \frac{\tau}{i\hbar} H\right) \psi(t) \equiv (1 + i\tau T)\psi, \quad (5.15)$$

т. е. оператор

$$T = -\frac{H}{\hbar} \quad (5.16)$$

является генератором сдвига во времени. *Закон сохранения энергии есть следствие инвариантности гамильтониана относительно сдвига во времени.* Эта инвариантность (однородность времени) имеет место, когда H не зависит явно от времени.

5.3. Представление Шредингера. Оператор эволюции. Функция Грина

Если спектр собственных значений оператора не меняется с течением времени, то в этом случае изменение состояния с течением времени определяется изменением (поворотом) вектора состояния согласно уравнению Шредингера. Такое представление операторов и векторов состояний носит название *представления Шредингера*.

Зависимость волновых функций от времени в представлении Шредингера может быть выражена с помощью унитарного преобразования (оператора эволюции):

$$\psi(\xi, t) = S(t)\psi(\xi), \quad (5.17)$$

где $\psi(\xi) = \psi(\xi, t=0)$; ξ – набор координат всех частиц системы, от которых зависит волновая функция. При $t=0$ оператор $S(t)$ совпадает с единичным оператором: $S(0) = 1$. Подставим равенство (5.17) в уравнение Шредингера:

$$\left[i\hbar \frac{\partial S(t)}{\partial t} - HS(t) \right] \psi(\xi) = 0. \quad (5.18)$$

Из формулы (5.18) непосредственно следует уравнение для оператора S

$$i\hbar \frac{\partial S(t)}{\partial t} = HS(t). \quad (5.19)$$

Если H не зависит явно от времени, то формальным решением с учетом $S(0) = 1$ будет

$$S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}. \quad (5.20)$$

Таким образом,

$$\psi(\xi, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \psi(\xi, 0), \quad (5.21)$$

и мы еще раз подтвердили, что гамильтониан есть генератор унитарного преобразования, представляющего сдвиг во времени.

Чтобы определить действие такого оператора на функцию $\psi(\xi)$, разложим ее по собственным функциям ψ_n оператора H :

$$\psi(\xi) = \sum_n c_n \psi_n(\xi), \quad c_n = \int \psi_n^*(\xi') \psi(\xi') d\xi'. \quad (5.22)$$

Тогда

$$\psi(\xi, t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_n(\xi) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(\xi) \quad (5.23)$$

или

$$\psi(\xi, t) = \sum_n \int \psi_n^*(\xi') \psi(\xi') d\xi' e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(\xi) \equiv \int G(\xi, \xi', t) \psi(\xi', 0) d\xi', \quad (5.24)$$

где функция

$$G(\xi, \xi', t) = \sum_n \psi_n(\xi) \psi_n^*(\xi') e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (5.25)$$

называется *функцией Грина системы*. Как следует из выражения (5.24), она представляет собой ядро интегрального оператора эволюции.

Из соотношения (5.24) следует, что если в начальный момент времени $t = 0$, система находилась в точке ξ_0 , т. е. ее волновая функция была равна

$$\psi(\xi', 0) = \delta(\xi' - \xi_0), \quad (5.26)$$

то

$$\psi(\xi, t) = G(\xi, \xi_0, t), \quad (5.27)$$

т. е. функция Грина имеет смысл амплитуды вероятности найти частицу в момент времени t в точке с координатами ξ , если в начальный момент $t = 0$ она находилась в точке ξ_0 (другими словами, это функция распространения из точки $(t = 0, \xi_0)$ в точку (t, ξ)). Формально это следует из того, что, как нетрудно убедиться, функция Грина (5.25) по ξ удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial G(\xi, \xi', t)}{\partial t} = H(\xi) G(\xi, \xi', t), \quad (5.28)$$

т. е. является волновой функцией по координатам ξ , с начальным условием

$$G(\xi, \xi', 0) = \sum_n \psi_n(\xi) \psi_n^*(\xi') = \delta(\xi - \xi'), \quad (5.29)$$

которое обозначает, что в момент $t = 0$ система находилась в точке с координатами ξ' .

Таким образом, еще раз убедились, что функция Грина $G(\xi, \xi', t)$ описывает распространение системы из точки $(0, \xi')$ в точку (t, ξ) . Заметим, что

$$\begin{aligned}
& \int d\xi' G(\xi, \xi', t-t') G(\xi', \xi_0, t') = \\
& = \int d\xi' \sum_{n, n'} \psi_n(\xi) \psi_n^*(\xi') e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t')} \psi_{n'}(\xi') \psi_{n'}^*(\xi_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n'} t'} = \\
& = \sum_n \psi_n(\xi) \psi_n^*(\xi_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = G(\xi, \xi_0, t),
\end{aligned} \tag{5.30}$$

т. е. амплитуда вероятности системе перейти из точки $(0, \xi_0)$ в точку (t, ξ) может быть представлена как произведение амплитуд перехода из точки $(0, \xi_0)$ в некоторую промежуточную точку (t', ξ') и из этой точки в конечную (t, ξ) . При этом по всем промежуточным точкам в силу их произвольности нужно просуммировать (проинтегрировать).

Заметим, что величина средней энергии системы в состоянии $\psi(\xi, t)$

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \int \psi^*(\xi, t) H \psi(\xi, t) d\xi = \\
&= \sum_{n, n'} c_n^* c_{n'} \left(\int \psi_n^*(\xi) \psi_{n'}(\xi) d\xi \right) E_{n'} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_{n'} - E_n) t} = \sum_{n, n'} |c_n|^2 E_n
\end{aligned} \tag{5.31}$$

не зависит от времени, и мы еще раз убеждаемся, что c_n есть амплитуда вероятности обнаружить у системы энергию E_n , т. е. набор величин c_n есть волновая функция системы в энергетическом представлении.

5.4. Представление Гейзенберга

В этом представлении волновые функции не изменяются с течением времени, а изменяются операторы, соответствующие физическим величинам.

Обозначим через $\psi_S(\xi, t)$ волновую функцию в представлении Шредингера, а $\psi_H(\xi)$ — не зависящую от времени волновую функцию в представлениях Гейзенберга. Вспоминая действие оператора эволюции

$$\psi(\xi, t) = S(t) \psi(\xi),$$

можем написать

$$\psi_H(\xi) = S^{-1}(t) \psi_S(\xi, t). \tag{5.32}$$

При таком преобразовании волновых функций одновременно преобразуются операторы по закону

$$\hat{F}_H(t) = S^{-1}(t) \hat{F}_S S(t). \tag{5.33}$$

Таким образом, если в представлении Шредингера операторы не зависели от времени, то в представлении Гейзенберга они от него зависят, а волновые функции — нет. Поскольку $S(0) = S^{-1}(0) = 1$, векторы состояний в представлении

Гейзенберга и в представлении Шредингера совпадают в момент времени $t = 0$. При $t = 0$ совпадают также и операторы в обоих представлениях.

Из $\hat{F}_H(0) = \hat{F}_S$ следует, что уравнение $\hat{F}_H(t) = S^{-1}(t)\hat{F}_H(0)S(t)$ определяет изменение за время t оператора в представлении Гейзенберга.

Таким образом (опустим индекс H), изменение оператора Гейзенберга за время Δt определится уравнением

$$\hat{F}(t + \Delta t) = S^{-1}(\Delta t)\hat{F}(t)S(\Delta t). \quad (5.34)$$

Учитывая, что

$$S^{-1}(\Delta t) = e^{\frac{i}{\hbar}H\Delta t} = 1 + \frac{i}{\hbar}H\Delta t + \dots, \quad S(\Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t} = 1 - \frac{i}{\hbar}H\Delta t + \dots, \quad (5.35)$$

получим

$$\hat{F}(t + \Delta t) = \hat{F}(t) + \frac{i}{\hbar}[H, \hat{F}]\Delta t + \dots,$$

откуда следует закон изменения операторов в представлении Гейзенберга с течением времени

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, H]. \quad (5.36)$$

Изменение оператора F за конечное время τ определяется выражением

$$\hat{F}(t + \tau) = e^{\frac{i}{\hbar}H\tau}\hat{F}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}H\tau}. \quad (5.37)$$

Таким образом, все операторы, коммутирующие с оператором Гамильтона, не меняются с течением времени и в представлении Гейзенберга.

Поскольку при $t = 0$ операторы представления Шредингера и операторы представления Гейзенберга совпадают, то вид операторов, коммутирующих с оператором H , остается неизменным при переходе от представления Шредингера к представлению Гейзенберга. В частности, это утверждение относится и к самому гамильтониану.

5.5. Представление взаимодействия

В квантовой механике часто приходится исследовать системы, состоящие из нескольких подсистем, взаимодействующих между собой. В этих случаях оператор Гамильтона можно представить в виде суммы двух членов

$$H = H_0 + \hat{V}, \quad (5.38)$$

где H_0 – оператор Гамильтона без учета взаимодействия частей системы; $\hat{V}$ – оператор их взаимодействия.

В таких задачах часто для описания изменения состояния системы с течением времени используется представление взаимодействия. Переход от волно-

вых функций представления Шредингера $\psi_s(\xi, t)$ к волновым функциям представления взаимодействия $\psi_{\text{int}}(\xi, t)$ осуществляется унитарным оператором

$$S_{\text{int}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}. \quad (5.39)$$

Следовательно,

$$\psi_{\text{int}}(\xi, t) = S_{\text{int}}(t) \psi_s(\xi, t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \psi_s(\xi, t). \quad (5.40)$$

Подставляя в уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi_s(\xi, t)}{\partial t} = (H_0 + \hat{V}) \psi_s(\xi, t) \quad (5.41)$$

функцию

$$\psi_s(\xi, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \psi_{\text{int}}(\xi, t), \quad (5.42)$$

получаем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \psi_{\text{int}}(\xi, t) = (H_0 + \hat{V}) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \psi_{\text{int}}(\xi, t) \quad (5.43)$$

или

$$H_0 e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \psi_{\text{int}}(\xi, t) + i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{int}}(\xi, t) = (H_0 + \hat{V}) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \psi_{\text{int}}(\xi, t). \quad (5.44)$$

Умножая слева обе части уравнения (5.44) на $\exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right)$, будем иметь

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{int}}(\xi, t) = \hat{V}_{\text{int}} \psi_{\text{int}}(\xi, t), \quad (5.45)$$

где

$$\hat{V}_{\text{int}} = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} = S_{\text{int}}(t) \hat{V} S_{\text{int}}^\dagger(t). \quad (5.46)$$

Таким образом, все операторы в представлении взаимодействия изменяются с течением времени так, что если F – оператор в представлении Шредингера, то оператор в представлении взаимодействия будет иметь вид

$$\hat{F}_{\text{int}} = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \hat{F} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} = S_{\text{int}}(t) \hat{F} S_{\text{int}}^\dagger(t). \quad (5.47)$$

Этот закон изменения операторов, как нетрудно убедиться, эквивалентен уравнению

$$\frac{d\hat{F}_{\text{int}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}_{\text{int}}, H_0]. \quad (5.48)$$

Представление взаимодействия является промежуточным между представлениями Шредингера и Гейзенберга. Операторы в этом представлении зависят от времени, как операторы гейзенберговского представления для системы с оператором Гамильтона H_0 .

Изменение же во времени вектора состояния в представлении взаимодействия обусловлено только оператором взаимодействия (см. равенство (5.45)).

5.6. Закон сохранения импульса

Итак, мы убедились, что закон сохранения энергии есть следствие однородности времени, т. е. инвариантности гамильтониана относительно сдвига во времени (выбора начала отсчета времени).

Аналогично закон сохранения импульса связан с инвариантностью гамильтониана по отношению к сдвигам в пространстве (однородность пространства). В этом случае преобразование волновой функции выглядит так:

$$\psi^S = S_{\delta\mathbf{a}} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{a}) = (1 + \delta\mathbf{a}\nabla) \psi(\mathbf{r}) = \left(1 + i\delta\mathbf{a} \frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}\right) \psi \equiv (1 + i\tau T_{\delta\mathbf{a}}) \psi, \quad (5.49)$$

т. е. оператор импульса является генератором сдвига в пространстве:

$$T_{\delta\mathbf{a}} = \frac{\nabla}{i} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (5.50)$$

Оператор $S_{\mathbf{a}}$ сдвига на конечный вектор $\mathbf{a}$ определится как произведение n малых трансляций на величину $\mathbf{a}/n$ при $n \rightarrow \infty$:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = S_{\mathbf{a}} \psi(\mathbf{r}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + i \frac{\mathbf{a}}{n} \frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}\right)^n \psi = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \hat{\mathbf{p}}} \psi. \quad (5.51)$$

Заметим, что оператор $S_{\mathbf{a}}$ не является эрмитовым, он – унитарный оператор. Тем не менее для свободной частицы он коммутирует с гамильтонианом: $[S_{\mathbf{a}}, H] = 0$, потому они имеют совместные собственные функции

$$\psi_{E\lambda}(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (5.52)$$

с собственными значениями

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m, \quad \lambda = e^{ika}. \quad (5.53)$$

Импульс тоже коммутирует с H и $S_{\mathbf{a}}$ и имеет в этом состоянии собственное значение $\hbar\mathbf{k}$.

5.7. Теорема Блоха

Если потенциал периодичен (например, по оси x), т. е. $U(x + a) = U(x)$, то это означает, что оператор Гамильтона инвариантен относительно конечного сдвига (трансляции) на вектор $\mathbf{a}$ (вдоль x), и, следовательно, $[S_a, H] = 0$. В таком поле собственные функции оператора Гамильтона (т. е. функции стационарных состояний) могут быть выбраны в виде $\psi_{E\lambda}(x)$, в котором они одновременно являются и собственными функциями оператора сдвига:

$$H\psi_{E\lambda} = E\psi_{E\lambda}, \quad \hat{S}_a\psi_{E\lambda} = \lambda\psi_{E\lambda}. \quad (5.54)$$

Если потребовать, чтобы функция $\psi_{E\lambda}(x)$ была конечной при $x \rightarrow \pm \infty$, то из соотношения

$$\psi_{E\lambda}(x \pm na) = \lambda^{\pm n} \psi_{E\lambda}(x) \quad (5.55)$$

следует $|\lambda| = 1$, т. е. λ можно представить в виде

$$\lambda = e^{iqa}. \quad (5.56)$$

Величину $\hbar q$ в этом случае называют *квазиимпульсом*. Конечно, истинный импульс не сохраняется в периодическом поле, так как $[H, \hat{\mathbf{p}}] \neq 0$.

Если такое решение переписать в виде

$$\psi_{E\lambda}(x) = e^{iqx} u_q(x), \quad (5.57)$$

то из

$$\psi_{E\lambda}(x + a) = e^{iqa} \psi_{E\lambda}(x)$$

следует

$$e^{iq(x+a)} u_q(x+a) = e^{iqa} e^{iqx} u_q(x).$$

Следовательно, функция $u_q(x)$ является периодической: $u_q(x) = u_q(x + a)$.

Утверждение о том, что в периодическом потенциале (например, в кристалле) волновая функция частицы имеет вид (5.57), где $u_q(x)$ – периодическая функция с периодом потенциала, является содержанием простейшего одномерного варианта теоремы Блоха (1928) [28].

5.8. Закон сохранения момента импульса

Аналогично можно показать, что закон сохранения момента импульса (или углового момента) – следствие инвариантности гамильтониана относительно поворотов (изотропность пространства, т. е. независимость законов природы от выбора направления координатных осей). Поворот точки, характеризуемой радиусом-вектором $\mathbf{r}$, например вокруг оси z на малый угол $\delta\varphi$, приводит к его изменению на вектор $\delta\mathbf{r}$ (рис. 5.1), равный по модулю $|\delta\mathbf{r}| = r \delta\varphi \sin \theta$ и который можно представить в виде модуля векторного произведения вектора малого уг-

ла поворота $\delta\phi$ (равного по величине углу $\delta\phi$ и направленного по оси вращения (z) по правилу правого винта) на сам вектор $\mathbf{r}$, т. е. $\delta\mathbf{r} = \delta\phi \times \mathbf{r}$.

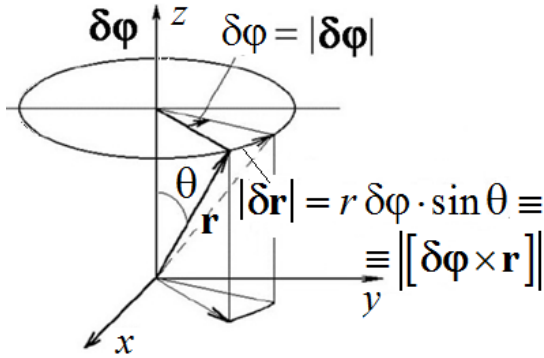


Рис. 5.1. Поворот вектора $\mathbf{r}$ на малый угол $\delta\phi$ вокруг оси z . Изменение вектора $\mathbf{r}$ равно $\delta\mathbf{r} = \delta\phi \times \mathbf{r}$, где $\delta\phi$ – вектор малого угла поворота, равного по величине $\delta\phi$ и направленного вдоль оси вращения по правилу правого винта

Как следствие, измененная волновая функция в результате такого поворота будет иметь вид

$$\begin{aligned}\psi^R &= R_{\delta\phi\mathbf{n}} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) = (1 + [\delta\phi \times \mathbf{r}] \nabla) \psi(\mathbf{r}) = \\ &= (1 + \delta\phi [\mathbf{r} \times \nabla]) \psi(\mathbf{r}) \equiv (1 + i\tau T) \psi,\end{aligned}\quad (5.58)$$

где T – генератор поворота

$$T = \frac{[\mathbf{r} \times \nabla]}{i} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}; \quad (5.59)$$

$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar[\mathbf{r} \times \nabla] = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]$ – оператор момента количества движения.

Оператор поворота на бесконечно малый угол $\delta\phi$ вокруг произвольной оси $\mathbf{n}$ может быть записан как

$$R_{\delta\phi\mathbf{n}} = 1 + i\delta\phi \frac{(\mathbf{n}\hat{\mathbf{L}})}{\hbar}. \quad (5.60)$$

Таким образом, генератором бесконечно малого поворота на угол $\delta\phi$ вокруг оси $\mathbf{n}$ является оператор проекции углового момента на эту ось $(\hat{\mathbf{L}}\mathbf{n})$.

Заметим, что если бесконечно малому повороту можно сопоставить аксиальный вектор $\delta\phi$, равный углу поворота и направленный по движению правого винта, то поворот на конечный угол вектором не является. Однако оператор поворота на угол ϕ относительно заданной оси $\mathbf{n}$ есть унитарный оператор

$$R_{\phi\mathbf{n}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{L}}\mathbf{n}\phi\right), \quad (5.61)$$

который представляет собой произведение бесконечного числа операторов малых поворотов на углы ϕ/n при $n \rightarrow \infty$.

Инвариантность оператора Гамильтона относительно произвольных бесконечно малых поворотов выражается коммутацией его с проекцией оператора углового момента на произвольное направление оси вращения

$$(\hat{\mathbf{L}}\mathbf{n})H = H(\hat{\mathbf{L}}\mathbf{n}), \quad (5.62)$$

где $\mathbf{n}$ – единичный вектор, направленный по оси вращения. Отсюда следует, что в свободном пространстве и в любом центрально-симметричном поле интегралом движения является проекция момента на произвольное направление. Если внешнее поле имеет аксиальную симметрию, то оператор Гамильтона инвариантен лишь по отношению к вращению вокруг аксиальной оси симметрии, и сохраняется только проекция углового момента на это направление.

5.9. Повороты осей координат в трехмерном пространстве. Генераторы поворота. Перестановочные соотношения

Связь между оператором проекции углового момента и инфинитезимальным оператором поворота вокруг этой оси можно использовать для определения операторов проекций углового момента и перестановочных соотношений между ними.

Рассмотрим повороты декартовой системы координат. Пусть α – угол поворота вокруг оси 3 (ось z ; рис. 5.2), тогда в исходной системе для координат точки P будем иметь

$$\begin{aligned} x_0 &= r \cos(\alpha + \varphi) = r \cos \varphi \cos \alpha - r \sin \varphi \sin \alpha = x'_0 \cos \alpha - y'_0 \sin \alpha, \\ y_0 &= r \sin(\alpha + \varphi) = r \cos \varphi \sin \alpha + r \sin \varphi \cos \alpha = x'_0 \sin \alpha + y'_0 \cos \alpha, \\ z_0 &= z'_0. \end{aligned} \quad (5.63)$$

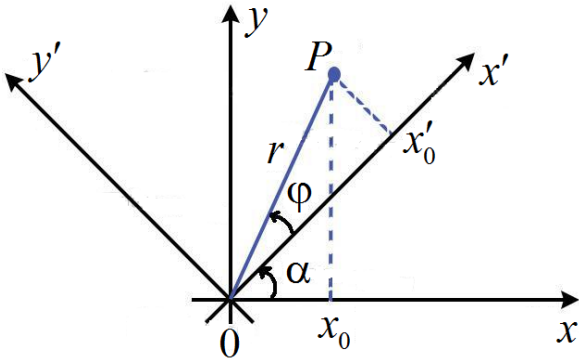


Рис. 5.2. Поворот системы координат вокруг оси z на угол α . В исходной системе координат $(x, y, z) \equiv (1, 2, 3)$ координаты точки P есть (x_0, y_0, z_0) , в повернутой (*штрихованной*) – (x'_0, y'_0, z'_0) ; r – длина радиуса вектора $\mathbf{r}$ в точку P ; φ – угол между $\mathbf{r}$ и осью x'

Обратное преобразование – это поворот на $-\alpha$, т. е.

$$\begin{aligned} x'_0 &= x_0 \cos \alpha + y_0 \sin \alpha, \\ y'_0 &= -x_0 \sin \alpha + y_0 \cos \alpha, \\ z'_0 &= z_0. \end{aligned} \quad (5.64)$$

В матричном виде (5.64) запишется как

$$\begin{pmatrix} x'_0 \\ y'_0 \\ z'_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}. \quad (5.65)$$

Таким образом, матрица $R_{\alpha 3}$, осуществляющая изменение координат вектора при повороте базисных векторов вокруг оси z на угол α , равна

$$R_{\alpha 3} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.66)$$

Она так же, как и унитарная матрица, сохраняет длину вектора, но в отличие от последней является вещественной и называется *ортогональной матрицей*. Она также удовлетворяет условию унитарности

$$R_{\alpha 3}^\dagger R_{\alpha 3} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv 1. \quad (5.67)$$

Матрицы поворота на угол α вокруг осей 1 и 2 (x и y) получаются аналогично. Они имеют вид

$$R_{\alpha 1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & \sin \alpha \\ 0 & -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}, \quad R_{\alpha 2} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & -\sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix}. \quad (5.68)$$

Для бесконечно малых поворотов эти операторы можно представить в виде

$$R_{\delta \alpha i} = 1 + \left. \frac{dR_{\alpha i}}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} \delta \alpha \equiv 1 + I_i \delta \alpha, \quad (5.69)$$

где операторы I_i , равные

$$I_i = \left. \frac{dR_{\alpha i}}{d\alpha} \right|_{\alpha=0}, \quad (5.70)$$

представляют собой генераторы поворота вокруг осей 1, 2, 3 с точностью до множителя, равного мнимой единице (см. соотношения (5.10)). Соответствующие матрицы получаются из матриц (5.66, 5.68):

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.71)$$

Используя выражения (5.71) и правила перемножения матриц, можно найти перестановочные соотношения между этими генераторами поворота, например:

$$[I_1, I_2] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -I_3.$$

Как нетрудно убедиться, два других соотношения оказываются такими, что их можно получить из этого круговой перестановкой индексов:

$$[I_1, I_2] = -I_3, \quad [I_3, I_1] = -I_2, \quad [I_2, I_3] = -I_1. \quad (5.72)$$

Сравнивая операторы поворота на бесконечно малые углы (5.69) и (5.60), видим, что каждому генератору поворота в нашем трехмерном пространстве отвечает соответствующий генератор в пространстве волновых функций:

$$1 + I_i \delta\alpha \rightarrow 1 + i \frac{\hat{L}_i}{\hbar} \delta\alpha,$$

т. е.

$$I_i \leftrightarrow i \frac{\hat{L}_i}{\hbar}, \quad (5.73)$$

где L_i – проекции углового момента на соответствующие оси. Тогда для них должны выполняться следующие перестановочные соотношения:

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = i\hbar \hat{L}_3, \quad [\hat{L}_3, \hat{L}_1] = i\hbar \hat{L}_2, \quad [\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar \hat{L}_1, \quad (5.74)$$

которые совпадают с полученными ранее (4.141) из явного вида оператора момента количества движения $\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$. Однако определение операторов углового момента через перестановочные соотношения (5.74) является более общим, поскольку следует из свойств нашего трехмерного пространства, преобразования векторов в котором отображаются в преобразованиях волновых функций в гильбертовом пространстве. В частности, как мы увидим далее, такое определение позволяет также описать и внутренний момент количества движения частицы – спин, который может принимать целые и полуцелые значения, в отличие от орбитального момента $[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$, который принимает только целые значения. Спин – понятие существенно квантовое, в классической физике его не существует.

5.10. Дискретные преобразования

Рассмотренные выше преобразования сдвигов и поворотов в пространстве относятся к классу непрерывных преобразований, так как они могут осуществляться путем многократного повторения бесконечно малых преобразований. Инвариантность оператора Гамильтона по отношению к этим преобразованиям

приводит к законам сохранения импульса и углового момента, которые соответствуют законам сохранения классической механики. Наряду с непрерывными преобразованиями условия симметрии могут выполняться для дискретных преобразований (например, трансляционная инвариантность кристалла), которые не сводятся к бесконечно малым или совсем не имеют количественной меры, как, например, зеркальное отражение (см. ниже).

В классической механике инвариантность по отношению к таким преобразованиям не приводит к законам сохранения. В квантовой же механике отсутствует принципиальное различие между непрерывными и дискретными преобразованиями, поэтому в квантовой механике законы сохранения следуют и из инвариантности по отношению к дискретным преобразованиям. Поэтому в квантовой механике свойства симметрии гамильтониана играют важную роль, в частности, они позволяют существенно упрощать выбор гамильтонианов для описания физических систем.

Для примера рассмотрим частицу, обладающую импульсом $\mathbf{p}$, спином $\mathbf{S}$ и моментом импульса $\mathbf{L}$, и попытаемся для ее описания найти наиболее общий вид гамильтониана, который, кроме кинетической энергии $p^2/2M$, содержит еще и члены, линейные по $\mathbf{p}$, $\mathbf{S}$ и $\mathbf{L}$.

Инвариантность по отношению к поворотам (изотропность пространства) ограничивает возможные комбинации из этих векторов скалярами. Их шесть:

$$(\mathbf{pL}), (\mathbf{pS}), (\mathbf{LS}), \mathbf{p}[\mathbf{S} \times \mathbf{L}], \mathbf{S}[\mathbf{p} \times \mathbf{L}], \mathbf{L}[\mathbf{p} \times \mathbf{S}]. \quad (5.75)$$

Если добавить требование инвариантности относительно *изменения движения на противоположное* (т. е. знака времени), останутся только первые три члена, поскольку последние три меняют знак при таком обращении движения. Требование, чтобы гамильтониан не менялся *при инверсии пространственных координат* (при изменении знака всех трех координат), оставляет только один член ($\mathbf{LS}$), так как остальные при этом изменяют знак. В результате простейшее добавочное взаимодействие, связанное с наличием спина у частицы, будет иметь вид

$$H = \beta(\mathbf{LS}). \quad (5.76)$$

Это известное спин-орбитальное взаимодействие, играющее важную роль как в атомной, так и в ядерной физике.

5.11. Инвариантность относительно инверсии координат (зеркальная симметрия)

Преобразования обращения движения и инверсии координат относятся к так называемым *дискретным преобразованиям*. В отличие от сдвигов и поворотов они не могут быть получены непрерывным образом из тождественного преобразования, т. е. не существует соответствующих бесконечно малых (инфинитезимальных) преобразований.

Заметим сначала, что инверсия пространственных координат (переход к новым координатам $x' = -x$, $y' = -y$, $z' = -z$) эквивалентна изменению знака одной из координат (т. е. зеркальному отражению относительно плоскости, ей перпендикулярной) и повороту на 180° относительно этой оси (рис. 5.3). Поэтому инвариантность относительно инверсии координат эквивалентна инвариантности относительно зеркального отражения в силу изотропности пространства (т. е. инвариантности относительно поворота на любой угол).

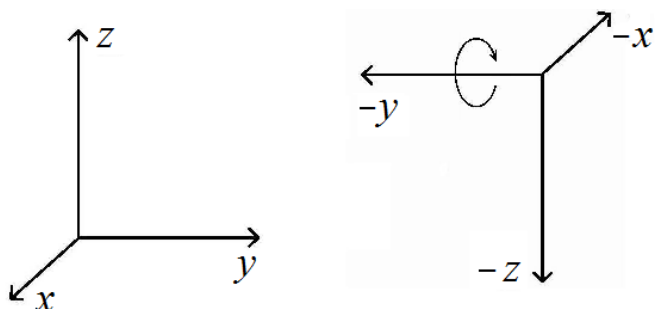


Рис. 5.3. Инверсия координат (изменение знаков всех координат) (справа) эквивалентна изменению знака одной координаты (зеркальному отражению в перпендикулярной плоскости) и затем повороту на 180° вокруг этой оси

Под инвариантностью относительно какого-либо преобразования понимают следующее: если в природе (т. е. нашем мире) существует некоторое явление (или процесс), то точно так же должен существовать и его двойник из «зеркального» мира – явление, к которому мы придем в результате преобразования.

Точно так же инвариантность законов природы относительно пространственной инверсии (P -инвариантность; см. рис. 5.3) означает, что если мы имеем некоторый существующий физический процесс или свойство реального объекта, то в результате зеркального отражения мы придем также к существующему процессу или свойству реального объекта. Причем обе реальности – первоначальная и зеркальная – должны быть равновероятны, т. е. одинаково часто встречаться в природе.

Например, рассмотрим движение свободной частицы со спином (электрона, нейтрона или γ -кванта). Направление спина частицы определяется осью ее вращения и правилом буравчика, т. е. если перед нами вращается частица по часовой стрелке, то ее спин направлен от нас. Пусть спин частицы параллелен направлению движения (как у правого винта, рис. 5.4). Зеркальное отражение (в плоскости, перпендикулярной импульсу) преобразует направление движения частицы на обратное и никак не изменяет направление вращения – ориентацию спина (когда мы идем навстречу зеркалу, наш зеркальный двойник идет нам навстречу, т. е. импульс в зеркале меняет знак, а направление вращения остается неизменным). Частица в зеркале движется в противоположную сторону, а вращается в первоначальном направлении, т. е. правый винт в зеркале превращается в левый. Правовинтовая частица в результате зеркального отражения превращается в левовинтовую. Такие зеркальные частицы также существуют в природе, причем «левые» и «правые» электроны, нейтроны, γ -кванты и большинство других частиц встречаются одинаково часто. Следовательно, указанные процессы распространения частиц являются P -инвариантными, и, более того, поскольку мы знаем, что электромагнитные взаимодействия между заря-

женными частицами осуществляются посредством обмена фотонами, то приведенный пример есть указание на то, что любые электромагнитные процессы инвариантны относительно зеркального отражения.

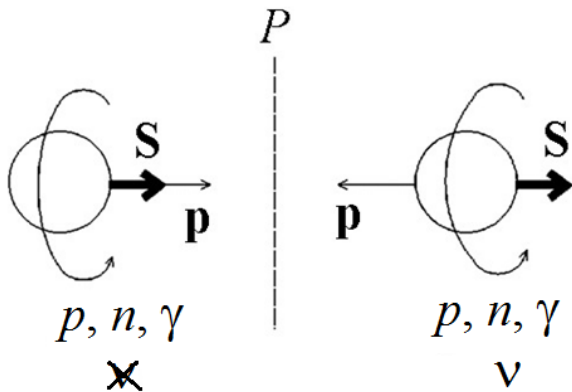


Рис. 5.4. Зеркально-инвариантные процессы распространения нейтрона (n), протона (p) и фотона (γ) со спинами S , параллельными либо антипараллельными импульсу p . Процесс распространения нейтрино (ν) нарушает зеркальную инвариантность, поскольку нейтрино со спином, параллельным импульсу, не существует

Примером зеркально-неинвариантного процесса служит распространение нейтрино. В нашем мире, насколько мы знаем сегодня, не встречается нейтрино, спин которого параллелен импульсу: они всегда антипараллельны (как говорят, спиральность нейтрино – проекция спина на импульс – отрицательна). Нейтрино рождаются в слабых взаимодействиях (ответственных, например, за β -распад ядер), поэтому можно считать, что слабые взаимодействия устроены так, что в отличие от электромагнитных они различают, где право, а где лево, т. е. нарушают зеркальную симметрию.

Впервые гипотезу о нарушении P -инвариантности в слабом взаимодействии выдвинули Ч. Ли и Ч. Янг [29] в 1956 г. на основе анализа так называемой ($\tau - \theta$)-проблемы, которая состояла в том, что частицы с совпадающими массами и временами жизни τ^+ и θ^+ распадались на три и два π -мезона соответственно. Эти конечные состояния имеют различную четность (см. далее). Ли и Янг предположили, что τ^+ и θ^+ – это одна и та же частица (позже ее назвали K^+ -мезоном), но слабое взаимодействие, которым обусловлен ее распад, не сохраняет четность. В 1957 г. Чжэндао Ли и Чжэньнин Янг были удостоены Нобелевской премии по физике «за теоретическое предсказание несохранения четности в слабых взаимодействиях».

Экспериментальное доказательство нарушения зеркальной инвариантности было получено в 1957 г. группой Ц. Ву [30], которая осуществила эксперимент, предложенный в работе [29], по β -распаду поляризованных ядер ^{60}Co ($^{60}\text{Co} \rightarrow ^{60}\text{Ni} + e^- + \bar{\nu}$). Оказалось, что электроны предпочитают вылетать против направления спина ядра (рис. 5.5).

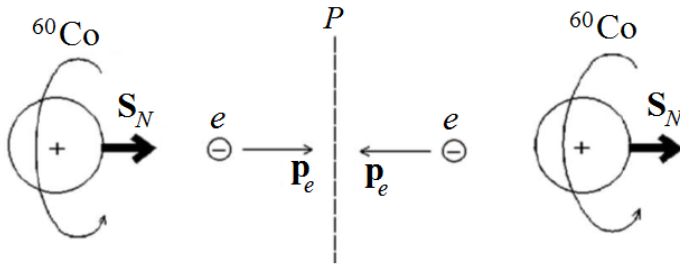


Рис. 5.5. Зеркально-неинвариантный β -распад ^{60}Co . Процесс, который изображен *справа*, оказался более вероятным, чем изображенный *слева*. При наличии зеркальной симметрии они были бы равновероятными, электроны вылетали бы изотропно

Математически выражение для вероятности распада, отражающее эту асимметрию, можно записать так:

$$W = W_0 [1 + a_{SP} (\mathbf{S}_N \mathbf{p}_e)]. \quad (5.77)$$

Здесь P -нечетная добавка $(\mathbf{S}\mathbf{p})$ (которую мы отбросили в (5.75)) как раз и дает нужную право-левую асимметрию. Степень асимметрии (т. е. степень нарушения P -инвариантности) определяется корреляционным коэффициентом a_{SP} .

Однако нарушенную симметрию можно восстановить. Давайте вместе с пространственным отражением (P) произведем операцию замены частиц на античастицы – зарядовое сопряжение (C). Тогда нейтрино перейдет в антинейтрино, а антинейтрино имеет противоположную спиральность (оно правовинтовое), и, следовательно, относительно операции CP -симметрия восстанавливается. В этом случае для β -распада мы получим следующую картинку (рис. 5.6).

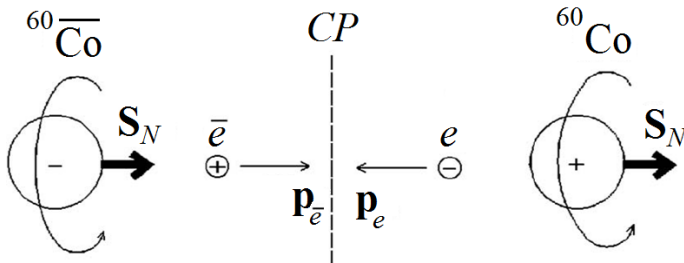


Рис. 5.6. CP -инвариантный β -распад. Процесс распада ^{60}Co , наблюдаемый в зеркале, – это процесс распада антикобальта, реально происходящий в антимире

То есть, добавив к зеркальному отражению операцию зарядового сопряжения, мы приходим опять к возможному процессу в нашем мире (с античастицами).

Таким образом, β -распад был бы изотропен, если бы наш мир состоял из одинаковой смеси ядер и антиядер и мы не умели различать частицы и античастицы.

Гипотезу о такой зарядово-зеркальной симметрии (или о сохранении комбинированной четности) выдвинули Ли, Янг [31] и независимо Л. Д. Ландау (будущий лауреат Нобелевской премии 1962 г.) [32] в 1957 г. Однако и эта симметрия устояла недолго. В 1964 г. было наблюденно [33] нарушение CP -инвариантности в распадах $K^0_2 \rightarrow 2\pi^0$, $K^0_2 \rightarrow \pi^+\pi^-$, которые запрещены CP -инвариантностью. Авторы этой работы Дж. Кронин и В. Фитч также были удостоены Нобелевской премии в 1980 г.

5.12. Четность и P -инвариантность

Сформулируем понятие P -инвариантности математически. Пусть имеется объект, состояние которого описывается волновой функцией ψ , удовлетворяющей уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi.$$

Оператор инверсии координат обозначим P , так что

$$\psi^P = P\psi. \quad (5.78)$$

Применим его к уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial P\psi}{\partial t} = PHP^{-1}P\psi.$$

Таким образом, опять получаем, что преобразованная функция также удовлетворяет уравнению Шредингера, но с другим гамильтонианом:

$$i\hbar \frac{\partial \psi^P}{\partial t} = H^P \psi^P, \quad H^P = PHP^{-1}. \quad (5.79)$$

Требование инвариантности законов природы относительно операции P означает равенство

$$H^P = H = PHP^{-1} \text{ или } HP - PH = [H, P] = 0. \quad (5.80)$$

В этом случае функция ψ^P также будет описывать возможное состояние той же системы или объекта. С другой стороны, равенство коммутатора нулю означает, что среднее $\langle P \rangle$ сохраняется во времени. Поэтому особый интерес представляют собственные значения оператора P

$$P|u\rangle = p|u\rangle.$$

Они сразу определяются, если потребовать, чтобы $|u\rangle$ была однозначной функцией координат, тогда $P^2|u\rangle = p^2|u\rangle = |u\rangle$ и $p = \pm 1$. Таким образом, оператор инверсии координат P оказывается одновременно и унитарным, и эрмитовым.

Состояния $|u_+\rangle$, удовлетворяющие соотношению

$$P|u_+\rangle = |u_+\rangle, \quad (5.81)$$

называются *состояниями положительной четности*. Состояния $|u_-\rangle$, удовлетворяющие

$$P|u_-\rangle = -|u_-\rangle, \quad (5.82)$$

называются *состояниями отрицательной четности*.

Важным следствием P -инвариантности является то, что собственные состояния P -инвариантного гамильтониана H , соответствующие невырожденным собственным значениям E , являются также и собственными состояниями оператора P , т. е. имеют определенную четность. Это является обобщением пунк-

та 3.1.3 для одномерной задачи о том, что волновые функции дискретных уровней четного гамильтониана (т. е. инвариантного относительно замены x на $-x$) имеют определенную четность и частным случаем теоремы о собственных функциях полного набора коммутирующих операторов.

Все наблюдаемые величины можно разделить на четные и нечетные в зависимости от того, меняют или нет знак при инверсии координат операторы, соответствующие этим величинам:

$$PA(+)P^{-1} = A(+), \quad PA(-)P^{-1} = -A(-). \quad (5.83)$$

Теорема. В состоянии с определенной четностью среднее значение любой P -нечетной величины равно нулю. Действительно, с одной стороны,

$$\langle A \rangle = \langle u_{\pm} | A | u_{\pm} \rangle, \quad (5.84)$$

а с другой –

$$\langle A \rangle \equiv \langle u_{\pm} | P^{-1} P A P^{-1} P | u_{\pm} \rangle = \langle u_{\pm} | P^{\dagger} (-A) P | u_{\pm} \rangle = -\langle A \rangle, \quad (5.85)$$

т. е. наблюдаемое значение $\langle A \rangle = 0$.

Для среднего P -нечетной величины в состоянии, которое есть комбинация состояний с противоположной четностью, будем иметь

$$\begin{aligned} \langle \alpha u_{+} + \beta u_{-} | A(-) | \alpha u_{+} + \beta u_{-} \rangle &= \alpha^{*} \beta \langle u_{+} | A | u_{-} \rangle + \beta^{*} \alpha \langle u_{-} | A | u_{+} \rangle = \\ &= 2 \operatorname{Re} \alpha^{*} \beta \langle u_{+} | A | u_{-} \rangle. \end{aligned} \quad (5.86)$$

Эта величина отлична от нуля только в случае, когда имеется смесь состояний противоположной четности, т. е. когда P -инвариантность нарушена, так что четность не сохраняется и, соответственно, не является квантовым числом.

Если считать, что электрический заряд Q – скаляр, т. е. P -четная величина, то отсюда следует, что магнитный заряд, электрический дипольный момент, магнитный квадрупольный момент являются P -нечетными, так что при наличии P -инвариантности в природе у любого объекта в основном состоянии, в частности у элементарных частиц, они должны отсутствовать. В то же время магнитный момент, электрический квадрупольный момент P -четны, и поэтому они имеются, например, у ядер и элементарных частиц.

Однако после обнаружения несохранения P -четности все оказалось сложнее. Наличие асимметрии в β -распаде как раз и означает неравенство нулю P -нечетной величины $\langle \cos \theta \rangle \sim \sigma \mathbf{p}$ (т. е. среднего косинуса угла вылета), которая и определяется величиной a_{sp} . Именно слабые взаимодействия и нарушают P -четность. Наличие же такой P -нечетной асимметрии в распадах и других ядерных реакциях позволяет обнаруживать очень малый вклад слабых взаимодействий, например, в структуру и свойства ядер или атомов, которые определяются подавляющим образом P -инвариантными сильными и электромагнитными взаимодействиями.

Поиск свойств элементарных частиц (например, электрического дипольного момента), запрещенных дискретными, такими как P - или CP -симметриями,

является одним из наиболее важных направлений современной физики низких энергий, включая нейтронные исследования. Подобного рода эксперименты открывают новые возможности более детального исследования как свойств уже известных взаимодействий, так и выявления наличия других, еще неизвестных взаимодействий или частиц.

Дополнительная литература

1. *Вейль Г.* Теория групп и квантовая механика / пер. с англ. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. 496 с.
2. *Кемпфер Ф.* Основные положения квантовой механики / пер. с англ. М.: Мир, 1967. 392 с.

Глава 6. Переход от квантовой механики к классической. Квазиклассическое приближение

Наиболее просто условия предельного перехода от квантовой механики к классической можно исследовать, представив волновую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, t)}. \quad (6.1)$$

Подставив ее в уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\mathbf{r})\psi, \quad (6.2)$$

получим

$$-\frac{\partial S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S. \quad (6.3)$$

Для свободной частицы, т. е. при $U(\mathbf{r}) = 0$, как мы видели,

$$S(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}\mathbf{r} - Et, \quad (6.4)$$

и уравнение для S дает просто связь между энергией и импульсом частицы:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (6.5)$$

где

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad \mathbf{p} = \nabla S. \quad (6.6)$$

В присутствии силового поля, если отбросить последнее слагаемое в правой части точного квантово-механического уравнения (6.3) для S , получилось бы известное из классической механики уравнение Гамильтона – Якоби для функции действия $S(\mathbf{r}, t)$:

$$-\frac{\partial S_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{(\nabla S_0)^2}{2m} + U(\mathbf{r}). \quad (6.7)$$

6.1. Отступление о принципе наименьшего действия в классической механике

Вещественная функции действия определяется через функцию Лагранжа L с помощью интеграла:

$$S_0(\mathbf{r}, t) = \int_{t_0}^t L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t') dt'. \quad (6.8)$$

Траектория движения частицы в классической механике нормальна к поверхности равных значений функции действия S_0 . Это непосредственно видно из того, что импульс частицы определяется градиентом функции действия:

$$\mathbf{p} = \nabla S_0 \equiv \text{grad } S_0. \quad (6.9)$$

Сама же траектория движения частицы из точки $\mathbf{r}(t_0)$ в точку $\mathbf{r}(t)$ определяется уравнениями движения, которые следуют из принципа наименьшего действия, который гласит, что частица движется из точки $\mathbf{r}(t_0)$ в точку $\mathbf{r}(t)$ таким образом, чтобы интеграл (6.8) имел наименьшее возможное значение, т. е. $\delta S_0 = 0$ или

$$\begin{aligned} \delta \int_{t_0}^t L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t') dt' &= \int_{t_0}^t \left[\frac{\partial L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t')}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \delta \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t')}{\partial \mathbf{r}} \delta \mathbf{r} \right] dt' = \\ &= \int_{t_0}^t \left[\frac{\partial L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t')}{\partial \dot{\mathbf{r}}} d\delta \mathbf{r} \right] + \int_{t_0}^t \frac{\partial L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t')}{\partial \mathbf{r}} \delta \mathbf{r} dt' = \\ &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \delta \mathbf{r} \Big|_{t_0}^t - \int_{t_0}^t \left[\frac{d}{dt'} \frac{\partial L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t')}{\partial \dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t')}{\partial \mathbf{r}} \right] \delta \mathbf{r} dt' = 0. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Учитывая, что начальная и конечная точки заданы, т. е. $\delta \mathbf{r}(t_0) = \delta \mathbf{r}(t) = 0$, получаем уравнения движения (уравнения Лагранжа)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)}{\partial \dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)}{\partial \mathbf{r}} = 0. \quad (6.11)$$

Определив функцию Лагранжа как разность кинетической и потенциальной энергии:

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = T(\dot{\mathbf{r}}) - U(\mathbf{r}) = \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(\mathbf{r}), \quad (6.12)$$

получаем уравнения Ньютона

$$\dot{\mathbf{p}} = -\nabla U(\mathbf{r}) \equiv -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}, \quad (6.13)$$

где по определению

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}}. \quad (6.14)$$

Функция Гамильтона определяется как

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \mathbf{p}\dot{\mathbf{r}} - L = \mathbf{p}\dot{\mathbf{r}} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}). \quad (6.15)$$

Уравнения

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \quad (6.16)$$

носят название *уравнений Гамильтона*. Как видим, в квантовой механике оператор, соответствующий функции Гамильтона, и есть оператор Гамильтона.

6.2. Условия перехода квантовой механики в классическую

Возвращаясь к точному квантовому уравнению (6.3) для действия $S(\mathbf{r}, t)$:

$$-\frac{\partial S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S,$$

видим, что переход от квантового уравнения к классическому соответствует формальному переходу к пределу $\hbar \rightarrow 0$. Поскольку $\hbar$ – величина постоянная, то такой предельный переход следует понимать так, что члены, содержащие $\hbar$, малы по сравнению с остальными членами уравнения.

Для упрощения рассмотрим стационарные состояния. В них энергия системы имеет определенное значение, и зависимость волновой функции от времени будет целиком определяться этим значением:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}.$$

Поэтому для стационарных состояний функцию $S(\mathbf{r}, t)$ можно представить в виде

$$S(\mathbf{r}, t) = \sigma(\mathbf{r}) - Et. \quad (6.17)$$

При этом уравнение для функции $S(\mathbf{r}, t)$ переходит в уравнение для $\sigma(\mathbf{r})$:

$$\frac{(\nabla \sigma)^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \sigma = 0. \quad (6.18)$$

Переход от квантовой механики к классической состоит в замене этого уравнения уравнением классической механики

$$\frac{(\nabla \sigma_0)^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E = 0. \quad (6.19)$$

Такая замена функции σ на σ_0 , зависящей только от координат и связанной с импульсом $\mathbf{p}$ частицы соотношением $\mathbf{p} = \nabla \sigma_0$, возможна, только если

$$(\nabla \sigma_0)^2 \gg \hbar |\nabla^2 \sigma_0|. \quad (6.20)$$

Это неравенство можно рассматривать как условие, при котором квантовая механика переходит в классическую. Его тождественно можно переписать как

$$p^2 \gg \hbar |\operatorname{div} \mathbf{p}|. \quad (6.21)$$

В частном случае одномерного движения оно преобразуется к виду

$$p^2 \gg \hbar \left| \frac{dp}{dx} \right|, \text{ или } \frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1, \quad (6.22)$$

или с учетом того, что $p = 2\pi\hbar/\lambda$,

$$\lambda \gg \frac{\lambda}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx}. \quad (6.23)$$

Условие (6.23) означает, что *изменение длины волны на расстоянии $\lambda/2\pi$ должно быть значительно меньше самой длины волны*. Если обозначить буквой a характерные размеры системы, то $d\lambda/dx \sim \lambda/a$, и неравенство (6.23) переходит в $\lambda \ll a$ или $ka \gg 1$.

Дифференцируя

$$p = \sqrt{2m(E - U)},$$

имеем

$$\left| \frac{dp}{dx} \right| = \frac{1}{2} \frac{2m}{\sqrt{2m(E - U)}} \left| \frac{dU}{dx} \right| = \frac{m}{p} \left| \frac{dU}{dx} \right|,$$

так что условию (6.22) можно придать форму

$$p^3 \gg \hbar m \left| \frac{dU}{dx} \right|. \quad (6.24)$$

Таким образом, классическое рассмотрение квантово-механических систем приближенно оправдывается при движении частиц с большими импульсами в потенциальном поле с малыми градиентами (т. е. в плавно меняющихся полях).

В этом случае можно развить приближенный метод решения квантовых задач, основанный на введении поправок в классическое описание. Этот метод получил название *квазиклассического приближения*, или *метода фазовых интегралов*. Иногда этот метод называют *приближением Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна (метод ВКБ)*.

6.3. Квазиклассическое приближение

Итак, волновая функция стационарного состояния представляется в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(\mathbf{r})}. \quad (6.25)$$

Учитывая равенство $2m[U(\mathbf{r}) - E] = -p^2$, уравнение (6.18) для фазы $\sigma(\mathbf{r})$ перепишем как

$$(\nabla\sigma)^2 - p^2 - i\hbar\nabla^2\sigma = 0. \quad (6.26)$$

Будем искать его решение в виде формального разложения по постоянной Планка, считая ее малой величиной (поскольку переходу к классическому пределу отвечает $\hbar \rightarrow 0$):

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \dots \quad (6.27)$$

Если условия квазиклассичности выполняются, то последующие члены в этом ряду значительно меньше предыдущих, и их число можно ограничить.

Подставляя разложение (6.27) в уравнение (6.26) и приравнивая коэффициенты, стоящие при одинаковых степенях $\hbar$, получаем систему связанных уравнений

$$\begin{aligned} (\nabla\sigma_0)^2 - p^2 &= 0, \quad 2\nabla\sigma_0\nabla\sigma_1 + \nabla^2\sigma_0 = 0, \\ (\nabla\sigma_1)^2 + \nabla^2\sigma_1 + 2\nabla\sigma_0\nabla\sigma_2 &\dots \end{aligned} \quad (6.28)$$

Из первого уравнения определяется σ_0 , затем из второго уравнения – σ_1 и т. д. Обычно ограничиваются учетом σ_0 и σ_1 .

Для иллюстрации рассмотрим одномерный случай. Тогда

$$\begin{aligned} (\sigma'_0)^2 - p^2(x) &= 0, \quad 2\sigma'_1 = -\frac{\sigma''_0}{\sigma'_0}, \\ 2\sigma'_2 &= -\frac{(\sigma'_1)^2 + \sigma''_1}{\sigma'_0} \dots \end{aligned} \quad (6.29)$$

Таким образом, последовательные приближения для производных $\sigma'_1, \sigma'_2 \dots$ получаются из нулевого приближения σ'_0 простым дифференцированием.

Из первого уравнения имеем

$$\sigma'_0 = \pm p(x) = \pm\sqrt{2m[E - U(x)]} = \pm\hbar k(x). \quad (6.30)$$

Из второго –

$$\sigma'_1 = -\frac{1}{2} \frac{\sigma''_0}{\sigma'_0} = -\frac{d}{dx} \frac{1}{2} \ln \sigma'_0 = -\frac{d}{dx} \ln \sqrt{p}, \quad (6.31)$$

так что

$$\sigma_1 = -\ln \sqrt{p} + \ln C = \ln \frac{C}{\sqrt{p}}, \quad (6.32)$$

где C – произвольная константа.

Интегрируя (6.30), определяем σ_0 :

$$\sigma_0(x) = \pm \int_a^x p(x) dx \equiv \pm \int_a^x \hbar k(x) dx = \pm \int_a^x \sqrt{2m[E - U(x)]} dx. \quad (6.33)$$

Подставляя $\sigma_0 + \sigma_1$ в выражение (6.25) для волновой функции, будем иметь

$$\psi(x) = C_1 e^{\frac{i}{\hbar} [\sigma_{0+}(x) + \sigma_1(x)]} + C_2 e^{\frac{i}{\hbar} [\sigma_{0-}(x) + \sigma_1(x)]} = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} e^{i \int_a^x k(x') dx'} + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} e^{-i \int_a^x k(x') dx'}. \quad (6.34)$$

Область, где $E > U(x)$, называется *классически допустимой* (или *доступной*) *областью движения*. В этой области $k(x)$ – вещественная функция и $\hbar k(x)$ – импульс частицы, зависящий от координат. В этой области волновую функцию можно всегда записать в виде волновой функции, зависящей от двух постоянных:

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{|p|}} \cos \left[\int_a^x k(x') dx' + \alpha \right], \quad (6.35)$$

где A определяет амплитуду; α – начальную фазу волновой функции.

Заметим, что в классической механике плотность вероятности найти частицу на отрезке dx определяется отношением времени пребывания dt частицы на этом отрезке к полному периоду T ее движения, т. е. обратно пропорциональна скорости частицы:

$$\frac{dW_{\text{класс}}}{dx} \propto \frac{dt}{T} \frac{1}{dx} \propto \frac{1}{v(x)}. \quad (6.36)$$

Это обстоятельство и отражено в полной амплитуде $A/\sqrt{|p|}$ волновой функции.

Значения x_i , при которых $E = U(x_i)$, называются *точками поворота*. Они соответствуют тем точкам пространства, в которых классическая частица останавливается, $p(x_i) = 0$, а затем движется обратно. Волновая функция в области точек поворота становится бесконечной. Эта расходимость связана с тем, что при малых значениях импульса квазиклассическое приближение становится неприменимым.

Пусть x_0 – точка поворота. Определим расстояние $|x - x_0|$, на котором еще можно пользоваться квазиклассическим приближением. Разлагая потенциальную энергию $U(x)$ вблизи $x = x_0$ в ряд, для p^2 можно написать:

$$p^2(x) = 2m[E - U(x)] \approx 2m \left| \frac{dU}{dx} \right| |x - x_0| = 2m|F| |x - x_0|, \quad (6.37)$$

где $F = -dU/dx$ – сила, действующая на частицу.

Вспоминая условие (6.24) применимости квазиклассики

$$p^3 \gg \hbar m \left| \frac{dU}{dx} \right| = \hbar m |F| \quad (6.38)$$

и умножая соотношение (6.37) на p , будем иметь

$$2mp \left| \frac{dU}{dx} \right| |x - x_0| \gg \hbar m \left| \frac{dU}{dx} \right|$$

или

$$|x - x_0| \gg \frac{\hbar}{2p} = \frac{\lambda}{4\pi}, \quad (6.39)$$

где λ – длина волны, соответствующая значению импульса в точке x . С другой стороны, поскольку из выражения (6.38) следует

$$\frac{1}{p} \ll \frac{1}{(\hbar m |F|)^{1/3}}, \quad (6.40)$$

то из соотношения (6.39) также вытекает и

$$|x - x_0| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m |F|} \right)^{1/3}. \quad (6.41)$$

Область, где $E < U(x)$, называется *классически недоступной областью движения* (кинетическая энергия отрицательна). В этой области волновой вектор $k(x)$ принимает мнимые значения.

Положив

$$k(x) = i\kappa(x), \quad \kappa(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[U(x) - E]}, \quad (6.42)$$

волновую функцию (6.34) в этой области можно переписать таким образом:

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} e^{-\int_a^x \kappa(x') dx'} + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} e^{\int_a^x \kappa(x') dx'}. \quad (6.43)$$

Первое слагаемое здесь (при $x > a$) экспоненциально убывает с ростом x , а второе – экспоненциально возрастает. Практическое использование этих квазиклассических функций возможно лишь в том случае, когда известна связь ос-

циллирующего решения (6.35) с экспоненциальным (6.43) при переходе через точки поворота. В малом интервале $[a, b]$, охватывающем точку поворота, с протяженностью l_q (см. соотношение (6.41)), равной

$$l_q \sim \left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^{1/3} \left| \frac{dU}{dx} \right|^{-1/3}, \quad (6.44)$$

нельзя пользоваться квазиклассическим приближением и необходимо решить точное одномерное уравнение Шредингера.

Связь между осциллирующим и экспоненциальным решениями находится из условий непрерывности перехода экспоненциального решения в точное при $x = a$ и точного решения в осциллирующее при $x = b$ (на рис 6.1 этому отвечает левая точка поворота).

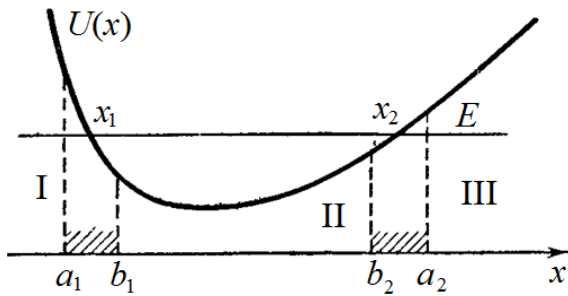


Рис. 6.1. Фinitное движение частицы в потенциальной яме. Область (x_1, x_2) является классически доступной. В областях вблизи точек поворота (a_1, b_1) и (b_2, a_2) необходимо точно решать уравнение Шредингера

Заметим, что из формулы (6.44) следует

$$l_q^3 \sim \left(\frac{\hbar^2}{m} \right) \left| \frac{dU}{dx} \right|^{-1} \equiv \frac{\hbar^2}{m^2 c^2 F} m c^2 = \lambda_c^2 L_F, \quad (6.45)$$

где L_F – длина, на которой работа силы F равна $FL_F = mc^2$, что позволяет оценить масштаб величины l_q .

6.4. Правила квантования Бора – Зоммерфельда

Рассмотрим фinitное движение частицы с энергией E (см. рис. 6.1). Потенциальная энергия $U(x)$ имеет минимум, так что при любой энергии $E > U_{\min}$ имеются только две точки поворота, определяемые условием $U(x_1) = U(x_2) = E$.

Около точки поворота x_1 выделим область $[a_1, b_1]$, а около точки поворота x_2 – область $[b_2, a_2]$, где неприменимо квазиклассическое приближение. В областях I, II и III можно использовать функции квазиклассического приближения. Экспоненциально убывающие в областях I, III функции при удалении от точек поворота будут иметь вид

$$\psi_I(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} e^{-\int_x^{x_1} \kappa(x') dx'}, \quad x \leq a_1; \quad \psi_{III}(x) = \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} e^{-\int_{x_2}^x \kappa(x') dx'}, \quad x \geq a_2. \quad (6.46)$$

Осциллирующее решение с двумя произвольными постоянными запишется в виде

$$\psi_{\text{II}}(x) = \frac{A}{\sqrt{|p|}} \cos \left[\int_{x_1}^x k(x') dx' + \alpha \right], \quad b_1 \leq x \leq b_2. \quad (6.47)$$

В областях $[a_1, b_1]$ и $[b_2, a_2]$ квазиклассическое приближение неприменимо, и надо решать уравнение Шредингера, которое можно записать в виде

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]. \quad (6.48)$$

Разложив в малом интервале $[a_1, b_1]$ значений x вблизи x_1 потенциальную энергию в ряд по $x - x_1$ и сохранив только два первых члена, получаем

$$U(x) = E - F \cdot (x - x_1), \quad F = \left| \left(\frac{dU}{dx} \right)_{x=x_1} \right| > 0. \quad (6.49)$$

В результате равенство (6.48) превращается в уравнение Шредингера для частицы в однородном силовом поле (в котором на частицу действует постоянная сила F):

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + F \cdot (x - x_1) \psi(x - x_1) = 0. \quad (6.50)$$

6.4.1. Частица в однородном поле. Импульсное представление

Потенциальная энергия частицы в однородном поле равна $V = -Fx$, где F – постоянная сила, действующая на частицу. Так выражается, в частности, потенциальная энергия заряженной частицы в однородном электрическом поле или, например, нейтрона в гравитационном поле Земли. Уравнение Шредингера с такой потенциальной энергией интересно и важно также тем, что его решение, как мы убедились выше, можно использовать для связи асимптотик волновых функций в классически разрешенной и запрещенной областях. Будем считать для определенности, что $F > 0$, поскольку вариант $F < 0$ сводится к тому же случаю $F > 0$ заменой $x \rightarrow -x$.

Уравнение Шредингера для этой задачи удобнее решать в импульсном представлении. Проведем преобразование операторов в это представление аналогично тому, как это делалось в главе 4, только с учетом того, что спектр оператора импульса во всем пространстве является непрерывным.

Рассмотрим действие оператора $\hat{F}$ на состояние $|a\rangle$ в координатном представлении ξ , т. е.

$$\langle \xi | b \rangle = \hat{F} \langle \xi | a \rangle. \quad (6.51)$$

Здесь через ξ мы обозначили набор всевозможных координат, характеризующих состояние. Определим вид оператора $\hat{F}$ в p -представлении.

Для этой цели разложим функции координатного представления по собственным функциям оператора импульса в координатном представлении $\langle \xi | p \rangle$:

$$\langle \xi | b \rangle = \int dp \langle \xi | p \rangle \langle p | b \rangle, \quad \langle \xi | a \rangle = \int dp \langle \xi | p \rangle \langle p | a \rangle. \quad (6.52)$$

Тогда действие оператора (6.51) запишется как

$$\int dp \langle \xi | p \rangle \langle p | b \rangle = \int dp \hat{F} \langle \xi | p \rangle \langle p | a \rangle. \quad (6.53)$$

Умножив обе части уравнения на сопряженную функцию $\langle p' | \xi \rangle$ и интегрируя по $d\xi$, получаем

$$\int d\xi \int dp \langle p' | \xi \rangle \langle \xi | p \rangle \langle p | b \rangle = \int d\xi \int dp \langle p' | \xi \rangle \hat{F} \langle \xi | p \rangle \langle p | a \rangle. \quad (6.54)$$

В результате, учитывая

$$\int d\xi \langle p' | \xi \rangle \langle \xi | p \rangle = \langle p' | p \rangle = \delta(p' - p), \quad (6.55)$$

поскольку, как мы отмечали, в случае непрерывного спектра δ -символы Кронекера заменяются δ -функциями (см. соотношения (4.31, 4.70)), будем иметь

$$\langle p' | b \rangle = \int dp \langle p' | \hat{F} | p \rangle \langle p | a \rangle. \quad (6.56)$$

Здесь

$$\langle p' | \hat{F} | p \rangle = \int d\xi \langle p' | \xi \rangle \hat{F} \langle \xi | p \rangle \quad (6.57)$$

представляет собой ядро интегрального оператора, или матричный элемент, между состояниями непрерывного спектра, т. е. матрицу $\langle p' | \hat{F} | p \rangle$ оператора $\hat{F}$, номера строк и столбцов которой пробегают непрерывный ряд значений. Хотя индексы p' и p изменяются непрерывно, тем не менее из формальных соображений удобно рассматривать все $\langle p' | \hat{F} | p \rangle$ как матрицу бесконечного ранга, число строк и столбцов которой может быть бесконечно.

Для иллюстрации рассмотрим одномерное движение вдоль оси x . Тогда в координатном представлении оператор импульса

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (6.58a)$$

В импульсном представлении оператор изображается непрерывной матрицей с элементами

$$\langle p' | \hat{p} | p \rangle = \int dx \langle p' | x \rangle \hat{p} \langle x | p \rangle = p \delta(p' - p), \quad (6.58b)$$

т. е. диагональной непрерывной матрицей. Таким образом, действие оператора импульса в импульсном представлении,

$$\langle p'|b\rangle = \hat{p}\langle p'|a\rangle = \int dp \langle p'|\hat{p}|p\rangle \langle p|a\rangle = p'\langle p'|a\rangle \quad (6.59)$$

сводится к умножению функций на значение импульса. Этот результат легко обобщается на трехмерный случай – достаточно заменить p вектором.

Определим также вид оператора координаты в импульсном представлении. Пользуясь общим выражением, имеем

$$\langle p'|\hat{x}|p\rangle = \int dx \langle p'|x\rangle x \langle x|p\rangle. \quad (6.60)$$

Учитывая явный вид собственных функций оператора импульса в координатном представлении

$$\langle x|p\rangle = Ae^{\frac{i}{\hbar}px},$$

легко убедиться, что умножение на x этой функции сводится к преобразованию

$$x \langle x|p\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle x|p\rangle. \quad (6.61)$$

Поэтому матричный элемент оператора $\hat{x}$ равен

$$\langle p'|\hat{x}|p\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int dx \langle p'|x\rangle \langle x|p\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(p' - p). \quad (6.62)$$

Таким образом, действие оператора координаты в импульсном представлении –

$$\langle p'|b\rangle = \hat{x}\langle p'|a\rangle = \int dp \langle p'|\hat{x}|p\rangle \langle p|a\rangle = -i\hbar \int dp \langle p|a\rangle \frac{\partial}{\partial p} \delta(p' - p),$$

или после интегрирования по частям находим, что

$$\langle p'|b\rangle = \hat{x}\langle p'|a\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p'|a\rangle. \quad (6.63)$$

Следовательно, в импульсном представлении оператор координаты равен

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'}. \quad (6.64)$$

Можно убедиться, что перестановочное соотношение $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ выполняется как в координатном, так и в импульсном представлениях.

Возвращаемся к однородному полю. Уравнение Шредингера в координатном представлении имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + F \cdot (x - x_1) \psi(x - x_1) = 0. \quad (6.65)$$

Подставляя в равенство (6.65) волновую функцию координатного представления в виде

$$\psi(x - x_1) = \int dp \varphi(p) e^{\frac{i}{\hbar} p(x - x_1)}, \quad (6.66)$$

где $\varphi(p)$ – волновая функция частицы в импульсном представлении (мы опускаем здесь нормировочные коэффициенты), находим

$$\begin{aligned} & \int dp \varphi(p) \left[-\frac{p^2}{2m} + F \cdot (x - x_1) \right] e^{\frac{i}{\hbar} p(x - x_1)} \equiv \\ & \equiv \int dp \varphi(p) \left[-\frac{p^2}{2m} + F \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right] e^{\frac{i}{\hbar} p(x - x_1)} = \\ & = \int dp e^{\frac{i}{\hbar} p(x - x_1)} \left[-\frac{p^2}{2m} - F \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right] \varphi(p) = 0. \end{aligned} \quad (6.67)$$

Здесь мы проинтегрировали второе слагаемое (6.67) по частям. В силу линейной независимости экспонент все коэффициенты перед ними должны быть равны 0. Формально можно умножить обе части последнего равенства (6.67) на $\exp[-ip'(x - x_1)/\hbar]$ и проинтегрировать по $d(x - x_1)$, а потом при помощи δ -функции – по dp . В итоге находим уравнение Шредингера в импульсном представлении для функции $\varphi(p)$:

$$\left[\frac{p^2}{2m} - i\hbar F \frac{d}{dp} \right] \varphi(p) = 0 \quad (6.68)$$

или

$$\frac{d}{dp} \ln \varphi(p) = -\frac{ip^2}{2\hbar m F}. \quad (6.69)$$

В результате для волновой функции в p -представлении имеем

$$\varphi(p) = C e^{-\frac{ip^3}{6\hbar m F}}, \quad (6.70)$$

и волновая функция в x -представлении равна

$$\psi(x - x_1) = C \int dp e^{\frac{i}{\hbar} \left[p(x - x_1) - \frac{p^3}{6mF} \right]}. \quad (6.71)$$

Введем новые безразмерные переменные

$$\xi = \left(\frac{\hbar^2}{2mF} \right)^{-1/3} (x_1 - x), \quad u = p(2mF\hbar)^{-1/3}. \quad (6.72)$$

Тогда

$$p(x - x_1) = -u(2mF\hbar)^{1/3} \left(\frac{\hbar^2}{2mF} \right)^{1/3} \xi = -\hbar \xi u \quad (6.73)$$

и

$$\frac{p^3}{6mF} = \frac{\hbar u^3}{3}. \quad (6.74)$$

В результате и ненормированное решение запишется в виде

$$\psi(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-i \left[u\xi + \frac{u^3}{3} \right]} = 2 \int_0^{\infty} du \cos \left(u\xi + \frac{u^3}{3} \right) \equiv 2\pi \Phi(\xi). \quad (6.75)$$

Здесь $\Phi(\xi)$ называется *функцией Эйри*. В таком виде определение функции Эйри было дано В. А. Фоком. В литературе встречается также $\text{Ai}(\xi) = \sqrt{\pi} \Phi(\xi)$.

Волновая функция (6.75) должна совпадать с квазиклассической при

$$|\xi| = \left(\frac{\hbar^2}{2mF} \right)^{-1/3} |x_1 - x| \gg 1, \quad (6.76)$$

см. выражение (6.41).

Рассмотрим интеграл

$$\psi(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-i \left[u\xi + \frac{u^3}{3} \right]}.$$

Для его приближенного вычисления в квазиклассической области при $\xi \gg 1$ используем метод, который называется *методом стационарной фазы*. Под интегралом имеем быстро осциллирующую по u экспоненту с малым периодом $2\pi/\xi$, так что вклад в интеграл дает малая область значений u вблизи некоторой точки u_0 , где фаза почти постоянна, т. е. вблизи значения u_0 , при котором производная от фазовой функции

$$\phi(u) = u\xi + u^3/3 \quad (6.77)$$

обращается в нуль:

$$\phi'(u) = \xi + u^2 = 0. \quad (6.78)$$

В результате имеем

$$u_{0\pm} = \pm \sqrt{-\xi} = \begin{cases} \pm i\sqrt{|\xi|}, & \xi > 0, \\ \pm \sqrt{|\xi|}, & \xi < 0. \end{cases} \quad (6.79)$$

Раскладывая фазу вблизи u_0 , получаем ее параболическую зависимость от $u - u_0$:

$$\phi(u) = \phi(u_0) + \frac{\phi''(u_0)}{2}(u - u_0)^2 = u_0 \xi + u_0^3/3 + 2u_0(u - u_0)^2. \quad (6.80)$$

В результате, поскольку вклад в интеграл дают две области вблизи $u_{0\pm}$, имеем

$$\psi(\xi) = e^{i(u_{0+}\xi + u_{0+}^3/3)} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{2iu_{0+}(u - u_{0+})^2} + e^{i(u_{0-}\xi + u_{0-}^3/3)} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{2iu_{0-}(u - u_{0-})^2}. \quad (6.81)$$

Интеграл от функций Гаусса в соотношении (6.81) вычисляется следующим образом. Обозначим

$$\Gamma = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2},$$

тогда

$$\Gamma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-a(x^2 + y^2)} = \int r d\varphi dr e^{-ar^2} = 2\pi \int_0^{\infty} \frac{1}{2} dr^2 e^{-ar^2} = \frac{\pi}{a},$$

так что $\Gamma = \sqrt{\pi/a}$, и слагаемые, входящие в соотношение (6.81), равны:

$$\psi_{\pm}(\xi) = e^{i(u_{0\pm}\xi + u_{0\pm}^3/3)} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{2iu_{0\pm}(u - u_{0\pm})^2} = \sqrt{\frac{\pi}{-2iu_{0\pm}}} e^{i(u_{0\pm}\xi + u_{0\pm}^3/3)}. \quad (6.82)$$

Обсудим полученные решения в разных областях.

1. $\xi \propto x_1 - x > 0$, $u_{0\pm} = \pm i\sqrt{|\xi|}$. В этом случае $x < x_1$, т. е. частица находится под барьером в классически запрещенной области (см. рис. 6.1). Мы должны выбрать затухающее решение, которое имеет место при $u_{0+} = i\sqrt{|\xi|}$:

$$\psi(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\xi^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right). \quad (6.83)$$

2. $\xi < 0$, $\xi = -|\xi|$, $u_0 = \pm\sqrt{|\xi|}$. В этом случае $x > x_1$, т. е. частица находится над барьером в классически разрешенной области (см. рис. 6.1). Здесь имеет место осциллирующее решение, т. е.

$$\psi(\xi) = \psi_+(\xi) + \psi_-(\xi), \quad (6.84)$$

где

$$\psi_{\pm}(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{|\xi|^{1/4}} (\pm i)^{1/2} e^{\pm i 2|\xi|^{3/2}/3} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{|\xi|^{1/4}} e^{\pm i(2|\xi|^{3/2}/3 + \pi/4)}. \quad (6.85)$$

Таким образом, в классически разрешенной области $\xi < 0$ ($x > x_1$) осциллирующее решение имеет вид

$$\psi(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{|\xi|^{1/4}} 2 \cos\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (6.86)$$

Вспоминаем, что в этой области ($x > x_1$), волновой вектор веществен:

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]} = \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} (x - x_1), \quad (6.87)$$

а также определение переменной ξ из формулы (6.72):

$$\xi = \left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3} (x_1 - x).$$

Нетрудно убедиться, что

$$\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} = \frac{2}{3} \sqrt{\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)} (x - x_1)^{3/2} \equiv \int_{x_1}^x \sqrt{\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)} (x' - x_1) dx' = \int_{x_1}^x k(y) dy. \quad (6.88)$$

В классически недоступной области $\xi > 0$ ($x < x_1$) имеем

$$\kappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E]} = \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} (x_1 - x). \quad (6.89)$$

Аналогично

$$\frac{2}{3}\xi^{3/2} = \frac{2}{3} \sqrt{\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)} (x_1 - x)^{3/2} = \int_x^{x_1} \kappa(y) dy. \quad (6.90)$$

Поскольку, как следует из равенства (6.87), $\sqrt{|p|} \propto |\xi|^{1/4}$, то решение нашей задачи вблизи границ a_1 и b_1 интервала $[a_1, b_1]$ (в областях I и II на рис. 6.1) можно записать как

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = \frac{B}{2\sqrt{p}} \exp\left(-\int_x^{x_1} \kappa(y) dy\right), & \text{у границы } a_1 (x_1 > x), \\ \psi_{II}(x) = \frac{B}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_{x_1}^x k(y) dy + \frac{\pi}{4}\right), & \text{у границы } b_1 (x_1 < x). \end{cases} \quad (6.91)$$

Сравнивая решение (6.91) с квазиклассическими решениями уравнений (6.46, 6.47) в областях I и II, получаем

$$\psi_I(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} e^{-\int_x^{x_1} \kappa(x') dx'}, \quad \psi_{II}(x) = \frac{A}{\sqrt{|p|}} \cos\left[\int_{x_1}^x k(x') dx' + \alpha\right]. \quad (6.92)$$

Мы видим, что волновая функция из области I будет непрерывно переходить в область II, если $B = A$, $B = 2C_1 = A$ и $\alpha = \pi/4$.

Решение на границах интервала $[b_2, a_2]$ в областях II и III можно получить из предыдущего (6.91), если изменить направление оси x на обратное (т. е. поменять местами пределы интегрирования) и в качестве фиксированного предела взять x_2 .

Таким образом, получим

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_{III}(x) = \frac{D}{2\sqrt{p}} \exp\left(-\int_{x_2}^x \kappa(y) dy\right), & x > x_2 \text{ (у границы } a_2), \\ \psi_{II}(x) = \frac{D}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_x^{x_2} k(y) dy + \frac{\pi}{4}\right), & x < x_2 \text{ (у границы } b_2). \end{cases} \quad (6.93)$$

Квазиклассическое решение уравнения (6.92) в области II также перепишем в виде, содержащем интеграл от x до x_2 :

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= \frac{A}{\sqrt{|p|}} \cos\left[\int_{x_1}^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right] \equiv \frac{A}{\sqrt{|p|}} \cos\left[\int_x^{x_1} k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right] \equiv \\ &\equiv \frac{A}{\sqrt{|p|}} \cos\left[\int_x^{x_2} k(x') dx' + \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2} + \int_{x_2}^{x_1} k(x') dx'\right]. \end{aligned} \quad (6.94)$$

Квазиклассическая функция в области III (6.46) имеет вид

$$\psi_{III}(x) = \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} e^{-\int_{x_2}^x \kappa(x') dx'}, \quad x > x_2. \quad (6.95)$$

Теперь нетрудно видеть, что решения у границы b_2 обеспечат плавный переход волновой функции из области II в области III, если выполняются условия:

$$\int_{x_2}^{x_1} k(x') dx' - \frac{\pi}{2} = n\pi, \quad n = 0, 1, 2... \quad (6.96)$$

и $D = 2C_2 = (-1)^n A$. Дискретность интеграла (6.96) приводит к дискретности спектра энергий.

Если ввести фазовый интеграл

$$\oint p dx = 2 \int_{x_2}^{x_1} p(x') dx' \quad (6.97)$$

по пути от точки x_1 до x_2 и обратно от x_2 до x_1 , т. е. интеграл по целому периоду классического движения, то равенство (6.96) перепишется в виде

$$\oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (6.98)$$

где n – целые числа: $n = 0, 1, 2, \dots$

Это равенство определяет стационарные состояния частицы для случая квазиклассического движения. Оно соответствует упоминавшемуся выше *правилу квантования Бора – Зоммерфельда*. Вне интервала (x_1, x_2) волновая функция экспоненциально затухает, внутри же этого интервала функция осциллирует:

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p}} \cos \left(\int_{x_1}^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right), \quad \int_{x_1}^{x_2} k(x') dx' = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (6.99)$$

Как следует из равенства (6.99), фаза функции при изменении x от x_1 до x_2 изменяется от $\pi/4$ до $(n + 3/4)\pi$, т. е. функция обращается n раз в нуль на этом интервале. Таким образом, квантовое число n определяет число узлов волновой функции в области между точками поворота.

Квазиклассическое приближение справедливо лишь на расстоянии нескольких длин волн от каждой из точек поворота. Следовательно, квазиклассическим приближением можно пользоваться лишь для состояний с большими значениями квантового числа n .

Фазовый интеграл определяет площадь, охватываемую в фазовом пространстве (x, p) классической траекторией. Из него следует, что одному состоянию в фазовом пространстве соответствует площадь $2\pi\hbar$. Таким образом, фазовое пространство, отвечающее одномерному движению частицы, делится на ячейки (отвечающие одному состоянию) площадью $2\pi\hbar$. При движении частицы в трехмерном пространстве одному состоянию будет соответствовать объем ячейки $(2\pi\hbar)^3$, что вполне согласуется с принципом неопределенностей.

В условии нормировки можно заменить квадрат быстро осциллирующего косинуса его средним значением, равным $1/2$:

$$\int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{mv} \cos^2 \left(\int_{x_1}^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{A^2}{2m} \int_{t_1}^{t_2} dt = \frac{A^2 T}{4m} = 1. \quad (6.100)$$

Здесь T – время прохождения частицей отрезка $x_2 - x_1$ туда и обратно (период движения). Таким образом,

$$A = \sqrt{\frac{4m}{T}} \equiv \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}}, \quad (6.101)$$

где $\omega = 2\pi/T$ – циклическая частота периодического движения частицы.

В результате нормированная волновая функция квазиклассического движения приобретает вид

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p}} \cos\left(\int_{x_1}^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right).$$

6.4.2. Гармонический осциллятор в квазиклассическом приближении

В качестве простейшего примера рассмотрим гармонический осциллятор, т. е. систему с потенциальной энергией $U(x) = kx^2/2$. Сила, действующая на частицу, равна $F = -kx$, она возвращает частицу назад при отклонении от положения равновесия $x = 0$. Классическое движение определяется уравнением Ньютона

$$m\ddot{x} = -kx \text{ или } \ddot{x} - \omega_0^2 x = 0, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (6.102)$$

Его решением являются гармонические колебания с частотой ω_0 и амплитудой a между двумя точками поворота $x = \pm a$:

$$x = a \cos(\omega_0 t + \phi). \quad (6.103)$$

Энергия и импульс осциллятора соответственно равны

$$E = \frac{m\omega_0^2 a^2}{2}, \quad p = \sqrt{2m(E - U)} = m\omega_0 \sqrt{(a^2 - x^2)}. \quad (6.104)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \oint p dx &= 2 \int_{-a}^a \sqrt{2m[E - U(x)]} dx = \\ &= 2m\omega_0 \int_{-a}^a \sqrt{(a^2 - x^2)} dx = 2m\omega_0 a^2 \int_{-1}^1 \sqrt{(1 - y^2)} dy = \xrightarrow{(y = \sin z)} = \\ &= 2m\omega_0 a^2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 z dz = m\omega_0 a^2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (1 + \cos 2z) dz = \pi m\omega_0 a^2 = \\ &= \frac{2\pi E}{\omega_0} = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right). \end{aligned} \quad (6.105)$$

В результате находим значения энергий стационарных состояний для больших n :

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (6.106)$$

Как увидим далее, точное решение уравнения Шредингера дает те же энергии стационарных состояний гармонического осциллятора для всех n .

При квазиклассическом движении $n \gg 1$, так что

$$E_{n+\Delta n} - E_n \approx \frac{dE_n}{dn} \Delta n. \quad (6.107)$$

Продифференцируем по n правило квантования:

$$\oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Получаем

$$2\pi\hbar = \oint \frac{dp}{dE_n} \frac{dE_n}{dn} dx = \oint \frac{dx}{v(x)} \frac{dE_n}{dn} = T_{\text{класс}} \frac{dE_n}{dn}, \quad (6.108)$$

где $T_{\text{класс}}$ — период классического движения. Отсюда следует, что разность соседних уровней (при $\Delta n = 1$) составляет

$$E_{n+\Delta n} - E_n \approx \frac{dE_n}{dn} \Delta n = \frac{2\pi\hbar}{T_{\text{класс}}} = \hbar\omega_{\text{класс}}, \quad (6.109)$$

где $\omega_{\text{класс}}$ — круговая частота классического движения.

Иными словами, на каждом небольшом участке квазиклассического спектра уровни эквидистантны.

Глава 7. Решение квантовых задач для прямоугольных потенциалов

7. 1. Отражение частиц от скачка потенциала

Рассмотрим потенциал в виде прямоугольного барьера, как изображено на рис. 7.1. Пусть на *барьер слева* (из области I, см. рис. 6.2) налетает частица с заданной энергией E и импульсом $\mathbf{p}$, направленным по x . В этой области решение уравнения Шредингера при $U(x) = 0$ имеет вид плоской волны

$$\psi = e^{ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \int_{V=1} \psi^* \psi dV = 1. \quad (7.1)$$

Эта волна нормирована на одну частицу в единице объема или (что то же самое) так, чтобы плотность потока частиц равнялась их скорости $\mathbf{v}$: $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v} = \mathbf{v}$ (см. равенства (2.45)).

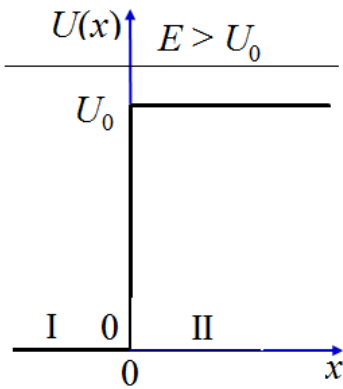


Рис. 7.1. Отражение частицы от скачка потенциала вида $U = 0$ при $x < 0$ (область I); $U = U_0$ при $x > 0$ (область II) при переходе из области I в область II. Случай $E > U_0$

Падающая слева волна имеет постоянную во времени плотность вероятности, при которой установившийся поток частиц, движущихся вправо, будет $j = v = p/m$. Чтобы поддерживать постоянную плотность вероятности (несмотря на ток), необходимо слева непрерывно добавлять частицы.

В точке, где происходит скачок потенциала, меняется импульс частицы, и в области I может появиться *отраженная волна* с той же энергией, но противоположным импульсом и некоторой амплитудой A , так что решение в области I при $x < 0$ следует записать так:

$$\psi_I = e^{ikx} + Ae^{-ikx}, \quad k = \sqrt{2mE / \hbar^2}. \quad (7.2)$$

Амплитуда *прошедшей волны* в области II, где $U(x) = U_0$, будет равна

$$\psi_{II} = Be^{ik_0x}, \quad k_0 = \sqrt{2m(E - U_0) / \hbar^2}. \quad (7.3)$$

Теперь в точке $x = 0$ следует «сшить» решения из разных областей, т. е. приравнять значения функций и их производных:

$$1 + A = B, \quad k(1 - A) = k_0 B. \quad (7.4)$$

Введя коэффициент преломления $\beta \equiv k_0/k$, из системы уравнений (7.4) для амплитуд прошедшей и отраженной волн соответственно получаем

$$B = \frac{2}{1+\beta} = \frac{2k}{k+k_0}, \quad A = B-1 = \frac{1-\beta}{1+\beta} = \frac{k-k_0}{k+k_0}. \quad (7.5)$$

Доля электронов K_t , которая проходит вправо, равна отношению прошедшего потока к начальному. Поэтому коэффициент прозрачности (или пропускания) барьера

$$K_t = \frac{|B|^2 \cdot k_0}{k} = \frac{4\beta}{|1+\beta|^2} = \frac{4kk_0}{|k+k_0|^2}. \quad (7.6)$$

При $k = k_0$ ($\beta = 1$) скачок потенциала отсутствует, поэтому $K_t = 1$.

Коэффициент отражения R в силу равенства потоков в прямой и отраженной волнах есть

$$R = |A|^2 = \left| \frac{1-\beta}{1+\beta} \right|^2 = \left| \frac{k-k_0}{k+k_0} \right|^2. \quad (7.7)$$

Нетрудно убедиться, что $K_t + R = 1$, что отражает сохранение тока вероятности.

Из равенств (7.2) и (7.3) находим, что для частицы в потенциале U_0 (например, в некоторой среде, обладающей таким потенциалом) коэффициент преломления этой среды

$$\beta = \sqrt{\frac{E-U_0}{E}} = \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}. \quad (7.8)$$

Спрашивается, а что произойдет при $E < U_0$. В этом случае коэффициент преломления и k_0 становятся мнимыми, т. е. мы можем положить

$$\beta = i\beta', \quad \beta' = \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1}. \quad (7.9)$$

В результате

$$R = \left| \frac{1-i\beta'}{1+i\beta'} \right|^2 = 1. \quad (7.10)$$

Происходит полное отражение волны от барьера. Это явление полного *внешнего* отражения абсолютно аналогично полному *внутреннему* отражению в оптике. Прошедшая волна при этом затухает вглубь потенциала, ее ток равен нулю.

7.2. Потенциальный барьер. Туннельный эффект

Рассмотрим теперь прохождение и отражение частиц от потенциала в виде прямоугольного барьера, изображенного на рис. 7.2.

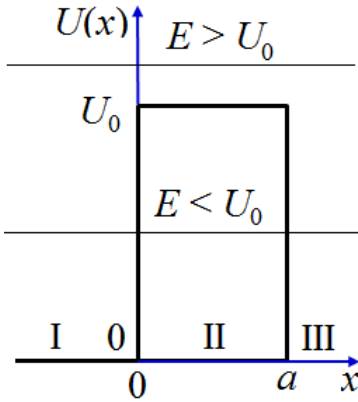


Рис. 7.2. Отражение частицы от прямоугольного потенциала в виде барьера высотой U_0 и шириной a : $U = 0$, $x < 0$ (область I); $U = U_0$, $0 < x < a$ (область II) и $U = 0$, $x > a$ (область III) и прохождение через барьер. Случай $E < U_0$

Пусть частицы слева падают на барьер с энергией, меньшей высоты барьера $E < U_0$. В этом случае в *классической теории* поток частиц, идущих слева, будет *полностью отражен*. Область II – классически недоступна.

В квантовой же механике нужно решать уравнение Шредингера, которое в областях I и III имеет вид

$$\psi'' = -k^2 \psi \equiv -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi, \quad x < 0, \quad x > a, \quad (7.11)$$

а в области II –

$$\psi'' = \kappa^2 \psi \equiv -\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \psi, \quad 0 < x < a. \quad (7.12)$$

Начнем с области III. Частиц, идущих справа, в этой области нет, но могут быть частицы, идущие вправо со стороны барьера. В области I имеем падающую вправо на барьер волну и волну, отраженную им влево. Под барьером же в области II имеем затухающее и растущее решения, причем, поскольку ширина барьера ограничена, оба решения конечны, и мы должны их учитывать оба. Таким образом,

$$\psi_{III} = Be^{ikx}, \quad \psi_I = e^{ikx} + Ae^{-ikx}, \quad \psi_{II} = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}. \quad (7.13)$$

В силу непрерывности волновой функции и ее производной эти решения необходимо «сшить» на границах областей $x = 0$ и $x = a$.

Граница $x = 0$. Из условий $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$, $\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0)$ имеем

$$1 + A = C + D,$$

$$\frac{ik}{\kappa}(1 - A) = C - D. \quad (7.14)$$

Складывая уравнения (7.14) и вычитая второе из первого, получаем

$$\begin{aligned} 1 + \frac{ik}{\kappa} + A \left(1 - \frac{ik}{\kappa} \right) &= 2C, \\ 1 - \frac{ik}{\kappa} + A \left(1 + \frac{ik}{\kappa} \right) &= 2D. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Граница $x = a$. Условия $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$, $\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$ дают

$$\begin{aligned} Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} &= Be^{ika}, \\ Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a} &= \frac{ik}{\kappa} Be^{ika}. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Опять складывая эти уравнения и вычитая одно из другого, будем иметь

$$\begin{aligned} 2C &= B \left(1 + \frac{ik}{\kappa} \right) e^{(ik - \kappa)a}, \\ 2De^{-\kappa a} &= \left(1 - \frac{ik}{\kappa} \right) e^{(ik + \kappa)a}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Сравнивая соотношения (7.17) и (7.15), исключаем C и D . В результате остаются два уравнения для нахождения амплитуд A и B :

$$\begin{aligned} 1 + \frac{ik}{\kappa} + A \left(1 - \frac{ik}{\kappa} \right) &= Be^{(ik - \kappa)a} \left(1 + \frac{ik}{\kappa} \right), \\ 1 - \frac{ik}{\kappa} + A \left(1 + \frac{ik}{\kappa} \right) &= Be^{(ik + \kappa)a} \left(1 - \frac{ik}{\kappa} \right). \end{aligned} \quad (7.18)$$

Для нахождения амплитуды B прошедшей через барьер волны удобно представить уравнения (7.18) в виде

$$\begin{aligned} A &= \frac{\left(1 + \frac{ik}{\kappa} \right) (Be^{(ik - \kappa)a} - 1)}{\left(1 - \frac{ik}{\kappa} \right)} = \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} (Be^{(ik - \kappa)a} - 1), \\ A &= \frac{\left(1 - \frac{ik}{\kappa} \right) (Be^{(ik + \kappa)a} - 1)}{\left(1 + \frac{ik}{\kappa} \right)} = \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} (Be^{(ik + \kappa)a} - 1). \end{aligned}$$

Тогда, приравняв их правые части, получаем

$$(\kappa + ik)^2 (Be^{(ik - \kappa)a} - 1) = (\kappa - ik)^2 (Be^{(ik + \kappa)a} - 1)$$

или

$$Be^{ika} \left[(\kappa + ik)^2 e^{-\kappa a} - (\kappa - ik)^2 e^{\kappa a} \right] = (\kappa + ik)^2 - (\kappa - ik)^2,$$

откуда в результате находим для амплитуды B прошедшей сквозь барьер волны выражение, содержащее гиперболические синус и косинус:

$$B = -\frac{2i\kappa k e^{-ika}}{(\kappa^2 - k^2) \operatorname{sh} \kappa a - 2i\kappa k \operatorname{ch} \kappa a}. \quad (7.19)$$

Аналогично из уравнений (7.18) можно получить следующее выражение для амплитуды A отраженной волны:

$$A = -\frac{(\kappa^2 + k^2) \operatorname{sh} \kappa a}{(\kappa^2 - k^2) \operatorname{sh} \kappa a - 2i\kappa k \operatorname{ch} \kappa a}. \quad (7.20)$$

Выражение (7.19) обычно записывают так:

$$B = -\frac{2e^{-ika}}{\frac{(\kappa^2 - k^2)}{i\kappa k} \operatorname{sh} \kappa a - 2 \operatorname{ch} \kappa a} = \frac{2e^{-ika}}{2 \operatorname{ch} \kappa a + i \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right) \operatorname{sh} \kappa a}. \quad (7.21)$$

Полученный результат показывает, что волновая функция частицы отлична от нуля и в области за барьером (рис. 7.3), следовательно, существует некоторая вероятность $|B|^2$ найти частицу за барьером при $x > a$, т. е. частица может проникнуть сквозь потенциальный барьер, который она никак не может преодолеть в классической теории. Как мы далее убедимся, вероятность быстро убывает с увеличением ширины барьера, а также с ростом его высоты.

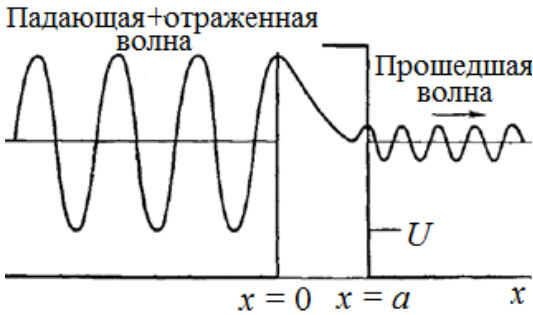


Рис. 7.3. Схематическое изображение волновой функции. Большая часть падающей волны отражается, но часть ее проходит через барьер в область с $x > a$

Проницаемость барьера (коэффициент прохождения, или коэффициент прозрачности) K_t определяется как отношение плотности потока прошедшей волны к плотности потока падающей. Так как для падающей волны $j_i = v$, для прошедшей $-j_t = |B|^2 v$, то

$$K_t = |B|^2 = \frac{4}{4 \operatorname{ch}^2 \kappa a + \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right)^2 \operatorname{sh}^2 \kappa a}. \quad (7.22)$$

Аналогично коэффициент отражения R барьером определяется величиной $A R = |A|^2$, причем из соотношений (7.19) и (7.20) следует, что

$$|A|^2 + |B|^2 \equiv R + K_t = 1, \quad (7.23)$$

что выражает закон сохранения потока: поток падающих на барьер частиц равен сумме потоков частиц, прошедших через барьер и отраженных от барьера.

Для высокого и широкого барьера при $\kappa a \gg 1$ выражение (7.22) для коэффициента прохождения упрощается, поскольку в этом случае $\operatorname{ch} \kappa a \approx \operatorname{sh} \kappa a \approx e^{\kappa a} / 2$, так что

$$K_t \approx \frac{4e^{-2\kappa a}}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right)^2} = \frac{16e^{-2\kappa a}}{2 + \frac{\kappa^2}{k^2} + \frac{k^2}{\kappa^2}} \equiv \frac{16e^{-2\kappa a}}{\left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right) \left(1 + \frac{k^2}{\kappa^2} \right)}.$$

В результате для прямоугольного барьера коэффициент прохождения (с точностью до медленно изменяющегося с величиной k предэкспоненциального множителя) можем написать

$$K_t \approx e^{-2\kappa a}. \quad (7.24)$$

Для плавного барьера, который можно представить в виде последовательности прямоугольных (рис. 7.4), находим

$$K_t \approx \prod_i e^{-2\kappa(x_i)\Delta x_i} = e^{-2\sum_i \kappa(x_i)\Delta x_i} \approx \exp \left(-2 \int_a^b \kappa(x) dx \right). \quad (7.25)$$

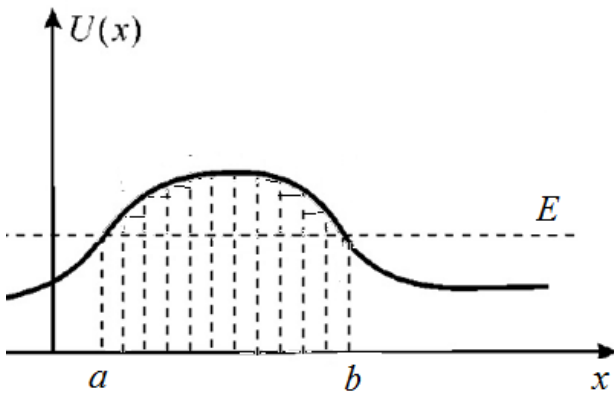


Рис. 7.4. Плавно меняющийся барьер представляется в виде последовательности достаточно широких (с шириной $\Delta x \gg 1/\kappa$) прямоугольных барьеров

Явление прохождения частиц сквозь потенциальный барьер называется *туннельным эффектом*. Это существенно квантовый эффект, отсутствующий в классической физике.

7.3. Холодная эмиссия электронов. Туннельный сканирующий микроскоп

Для иллюстрации вычислим вероятность испускания электронов из металла под действием сильного внешнего поля (*холодная эмиссия электронов*). Этот эффект был обнаружен в конце XIX столетия известным американским ученым Робертом Вудом [34], а объяснен лишь в 1928 г. (см. работы [35–38]) с помощью квантово-механических представлений о туннелировании.

Потенциальная энергия электрона внутри и вне металла может быть изображена как на рис. 7.5а. Внутри металла электрон имеет энергию $E < U_0$, где U_0 – потенциальная энергия электрона вне металла. Таким образом, имеем

$$U(x) = 0 \text{ при } x < 0; U(x) = U_0 \text{ при } x > 0,$$

причем электрон связан внутри кристалла с энергией связи $W < U_0$. Чтобы его вырвать из металла, ему необходимо сообщить энергию, большую, чем энергия связи $W = U_0 - E$ (она порядка 4–10 эВ, ее еще называют *работой выхода*).

Если же снаружи приложить электрическое поле $\mathcal{E}$, направленное внутрь металла, т. е. действующее на электрон наружу по оси x , то потенциальная энергия изменится следующим образом:

$$U(x) = 0 \text{ при } x < 0; U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x \text{ при } x > 0.$$

Ее вид изображен на рис. 7.5б. В этом случае возникает возможность вылета электрона из металла в вакуум путем прохождения через потенциальный барьер. В результате при приложении электрического поля появляется туннельный ток из протуннелировавших электронов, пропорциональный проницаемости барьера и напряженности электрического поля.

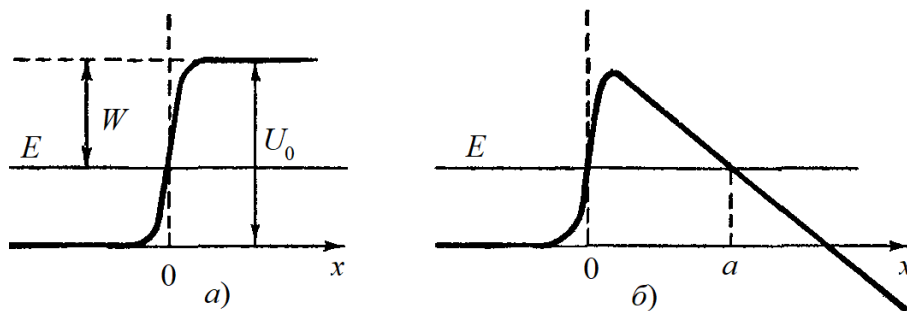


Рис. 7.5. Зависимости $U(x)$: x – расстояние от границы металла, ось x перпендикулярна границе металла и направлена наружу, $W = U_0 - E > 0$ – энергия связи электрона в металле (а). То же самое в присутствии электрического поля величиной $\mathcal{E}$, приложенного снаружи металла и направленного против оси x , так что потенциальная энергия электрона за пределами металла при $x > 0$ в этом случае равна $U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x$, здесь $e = |e|$ – величина заряда электрона (б)

Область сильного изменения потенциала вблизи поверхности металла имеет порядок размера атомов ($\sim 10^{-8}$ см), а расстояние a , при котором $U(a) = E$ или $e\mathcal{E}a = W$, даже при $e\mathcal{E} = 1$ МэВ/см есть $a \sim 10^{-6}$ см, что много больше размера атома. Поэтому на всем отрезке $(0, a)$ потенциальную кривую можно считать прямой линией:

$$U(x) - E = W - e\mathcal{E}x,$$

так что

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(W - e\mathcal{E}x)}{\hbar^2}} \quad (7.26)$$

и

$$K_t \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^a [2m(W - e\mathcal{E}x)]^{1/2} dx\right) = \exp\left[-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar e\mathcal{E}} W^{3/2}\right]. \quad (7.27)$$

Окончательно, поскольку $e\mathcal{E} = W/a$, получаем

$$K_t \approx \exp\left[-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2mW}}{\hbar} a\right] \equiv \exp\left[-\frac{4}{3} \kappa_0 a\right]. \quad (7.28)$$

Таким образом, эмиссионный ток экспоненциально зависит от a (т. е. от шероховатости, поверхности). Величина κ_0 при $W \sim 5$ эВ равна

$$\kappa_0 = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m^2 c^2 W}{\hbar^2 m c^2}} = \frac{1}{\lambda_{ce}} \sqrt{\frac{2W}{mc^2}} \approx 1,2 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}. \quad (7.29)$$

Явление холодной эмиссии электронов было положено в основу действия сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). В СТМ острая металлическая игла (зонд) подводится к образцу на расстояние нескольких ангстрем (рис. 7.6). При подаче на иглу (катод) потенциала относительно образца (анод) возникает *туннельный ток*. Величина этого тока экспоненциально зависит от расстояния «образец – игла». Типичные значения силы тока – от единиц до тысячных наноампера – при расстояниях «образец – игла» $\sim (3-10) \text{ \AA}$.

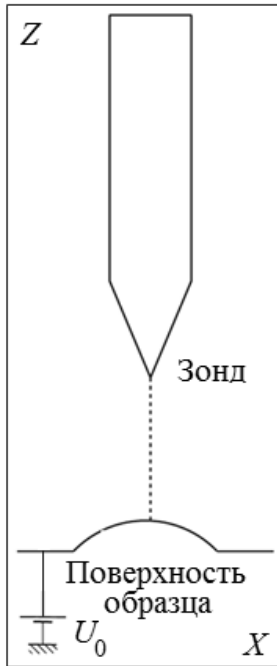


Рис. 7.6. Принципиальная схема сканирующего туннельного микроскопа. Иглу зонда подводят по вертикали (ось Z) к поверхности образца до появления туннельного тока. Затем перемещают зонд над поверхностью по осям X, Y (сканирование)

Устройство чувствительно к изменениям расстояний на уровне 10^{-8} см. Сейчас СТМ используются как в промышленных, так и в фундаментальных исследованиях для получения изображений металлических поверхностей и других материалов в атомном масштабе. Также возможно добиться небольших туннельных токов, если, например, биологические материалы распределить в виде тонких пленок по проводящим подложкам.

Изобретенное в 1981 г., это устройство дало первые изображения отдельных атомов на поверхностях материалов, и уже в 1986 г. авторы изобретения СТМ Герд Бинниг и Генрих Рорер (см. статью [39]) были удостоены Нобелевской премии. Они разделили ее с немецким ученым Эрнстом Руска, создателем первого электронного микроскопа.

Имеется два варианта сканирования поверхности:

1) при сканировании ток поддерживается постоянным за счет перемещения иглы зонда по вертикали (нормали к поверхности). При этом зонд остается на одном и том же расстоянии L от поверхности образца. Вертикальное же перемещение зонда (для сохранения тока, т. е. расстояния L) прямо отражает рельеф поверхности образца;

2) вертикальное положение иглы фиксировано, перемещают иглу зонда только по горизонтали. Рельеф поверхности определяется путем расчета из изменения туннельного тока.

7.4. Альфа-распад радиоактивных ядер. Закон Гейгера – Неттола

Явление α -распада вполне аналогично рассмотренному ранее эффекту холодной эмиссии электронов. Внутри ядра α -частицы (как протоны и нейтроны) удерживаются ядерными силами (рис. 7.7). За его пределами при $r > R_A$ имеем кулоновский отталкивательный потенциал. Коэффициент проницаемости оболочки ядра для α -частицы определяется *высотой и шириной кулоновского барьера*. Высота барьера

$$U_Q(R_A) = \frac{zZe^2}{R_A} = \frac{zZ}{A^{1/3}} \cdot \frac{e^2}{R_0} \approx \frac{zZ}{A^{1/3}} \text{ МэВ } (R_0 = 1,4 \cdot 10^{-13} \text{ см}), \quad (7.30)$$

где z – заряд α -частицы в единицах элементарного заряда электрона e ; Z – заряд оставшегося после распада ядра; A – его массовое число (число нуклонов); R_A – радиус ядра (см. рис. 7.7); R_0 – радиус нуклона.

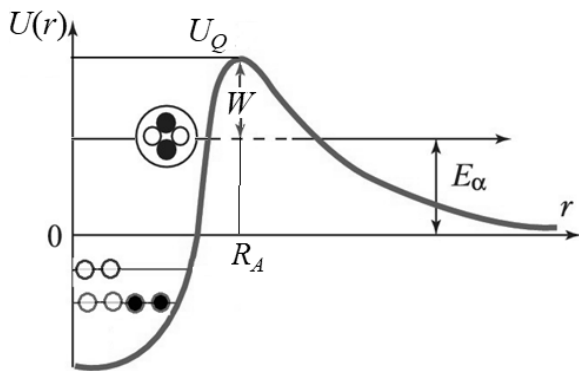


Рис. 7.7. Потенциальная энергия U α -частицы в поле ядра в зависимости от расстояния r до центра ядра. Кулоновское отталкивание на больших расстояниях $r > R_A$ сменяется ядерным притяжением при $r < R_A$. Здесь R_A принимается за радиус ядра. При энергии $E_\alpha > 0$ α -частица может преодолеть кулоновский барьер высотой U_Q и вылететь из ядра

Если представить ядро в виде капли несжимаемой жидкости (так называемая *модель жидкой капли*), то объем ядра будет приблизительно равен сумме объемов составляющих его нуклонов: $V = AV_0$, или, другими словами, объем, приходящийся на один нуклон (определяющий плотность нуклонов), $V_0 = V/A$, для всех ядер одинаков. То есть $4\pi R_A^3/3 = A4\pi R_0^3/3$ или

$$R_A = R_0 \cdot A^{1/3}, \quad (7.31)$$

что и было использовано в формуле (7.30). Экспериментальное значение R_0 для α -распада равно $R_0 = 1,4 \cdot 10^{-13}$ см = 1,4 Фм. Здесь внесистемная единица длины 1 Фм = 10^{-13} см, используемая в ядерной физике, носит название ферми (Фм), она совпадает с фемтометром (фм) в системе единиц СИ.

Также в формуле (7.30) использовалось численное значение

$$\frac{e^2}{R_0} = \frac{e^2 \hbar c}{\hbar c R_0 m_p c^2} \cdot m_p c^2 = \frac{\alpha \cdot \hbar_{cp}}{R_0} \cdot m_p c^2 \approx 1,02 \text{ МэВ}. \quad (7.32)$$

В одномерном варианте потенциал, изображенный на рис. 7.7, можно представить следующим образом (рис. 7.8). Или совсем упрощенно, как это показано на рис. 7.9.

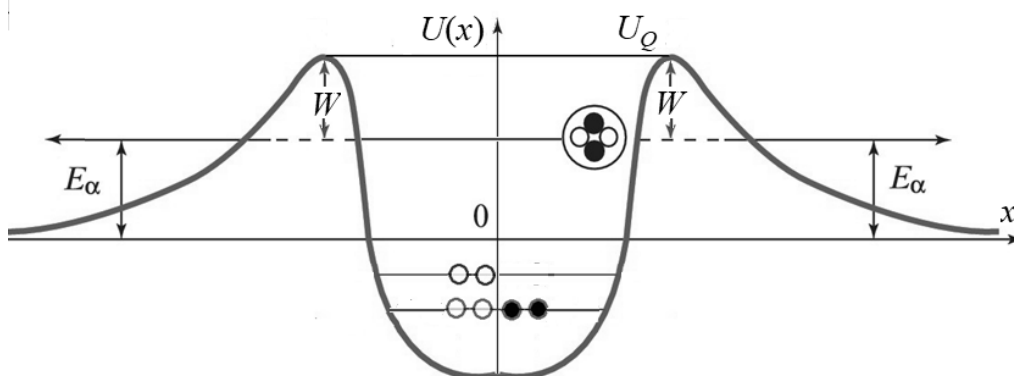


Рис. 7.8. Потенциальная энергия U α -частицы в поле ядра в зависимости от расстояния x до центра ядра. Одномерный вариант рис. 7.7

Для ядер изотопа радия $^{226}_{88}\text{Ra}$ ($Z = 88$, $A = 226$) и урана $^{238}_{92}\text{U}$ ($Z = 92$, $A = 238$) высоты барьеров ~ 29 МэВ и 30 МэВ соответственно. Радиусы этих ядер $R_A \sim 10^{-12}$ см = 10 Фм.

Таким образом, ширина кулоновского барьера при энергии частицы, например, $E_\alpha \sim 3$ МэВ имеет порядок $b \sim (U_Q/E_\alpha)R_A \sim 100$ Фм = 10^{-11} см, что существенно превосходит размер ядра и тем более область его границы, размер которой ~ 1 Фм. Глубины потенциалов для тяжелых ядер ($A > 100$) имеют порядок $40\text{--}50$ МэВ. Энергии α -частиц, испускаемых при α -распаде ядер, лежат в пределах $1\text{--}10$ МэВ.

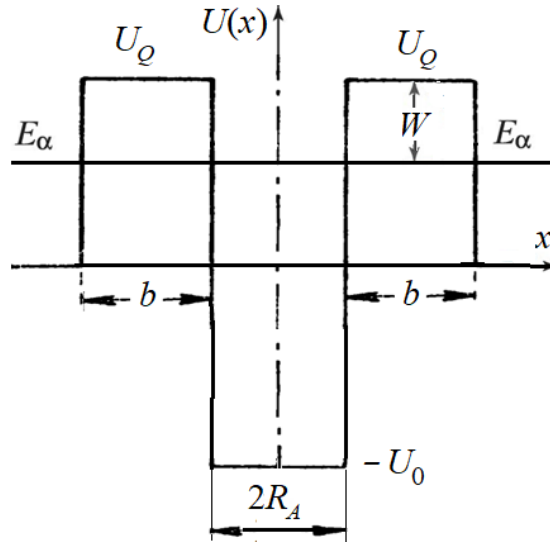


Рис. 7.9. Упрощенный вариант вида потенциальной энергии U α -частицы

Итак, будем считать, что движение α -частицы внутри ядра, т. е. в яме глубиной U_0 приблизительно такое же, как если бы ширина b окружающей потенциальной «горы» была бесконечной, что не позволяло бы частицам выйти из ядра. Длина волны частицы вне ядра (при $E_\alpha \sim 4$ МэВ)

$$\lambda = 2\pi\hbar / m_\alpha v = \lambda_{c\alpha} c / v \approx \lambda_{c\alpha} \left(m_\alpha c^2 / 2E_\alpha \right)^{1/2} \sim 22\lambda_{c\alpha} \sim 1 \text{ Фм.} \quad (7.33)$$

Ее скорость вне ядра –

$$v = c \left(2E_\alpha / m_\alpha c^2 \right)^{1/2} \sim c / 22 \approx 1,4 \cdot 10^9 \text{ см/с.} \quad (7.34)$$

Будем считать, что вместо одной частицы на интервале $(-R_A, R_A)$ имеется N частиц, т. е. волновая функция в этом интервале нормирована так:

$$\int_{-R_A}^{R_A} |\psi|^2 dx = N. \quad (7.35)$$

Функция $\psi(x)$ представляет собой суперпозицию волн, распространяющихся в противоположных направлениях из-за отражений от стенок $x = R_A$ и $x = -R_A$. Но в реальности отражение не является полным, так как и U_Q , и b конечны. По-

этому часть частиц проникает сквозь барьер, так что относительное число частиц, проходящих через какую-нибудь из стенок в единицу времени, равно произведению плотности тока j в направлении к этой стенке на коэффициент проницаемости K_t . Величина j равна произведению линейной плотности числа частиц в падающем пучке, которая есть (см. равенство (7.35))

$$\frac{1}{2}|\psi|^2 = \frac{1}{2} \frac{N}{2R_A} \quad (7.36)$$

(здесь множитель $1/2$ соответствует тому, что одна половина частиц движется в одном направлении, а другая – в противоположном), на скорость частицы внутри ядра:

$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m_\alpha} = \sqrt{\frac{2}{m_\alpha}(E_\alpha + U_0)} = c \sqrt{\frac{2(E_\alpha + U_0)}{m_\alpha c^2}} \approx c \sqrt{\frac{2 \cdot 32 \text{ МэВ}}{4000 \text{ МэВ}}} \approx 4 \cdot 10^9 \frac{\text{см}}{\text{с}}. \quad (7.37)$$

Складывая токи через обе стенки, мы получим для скорости изменения N со временем уравнение

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N}{2R_A} v_0 K_t, \quad (7.38)$$

где $Nv_0/2R_A$ – число ударов частиц в стенки ядра за единицу времени; K_t – коэффициент проницаемости стенок.

Решение уравнения (7.38) дает экспоненциальный закон радиоактивного распада ядра

$$N = N_0 e^{-\gamma t} \equiv N_0 e^{-t/\tau} \equiv N_0 2^{-t/T_{1/2}}. \quad (7.39)$$

Здесь γ – постоянная распада; τ – время жизни ядра; $T_{1/2} = \tau \ln 2$ – период его полураспада; постоянная распада γ

$$\gamma \equiv \frac{1}{\tau} = \frac{v_0 K_t}{2R_A} = \frac{v_0}{2R_A} e^{-\phi(E_\alpha)}, \quad (7.40)$$

где коэффициент проницаемости представлен в виде $K_t \approx \exp[-\phi(E_\alpha)]$.

В простейшем случае прямоугольных барьеров имеем (см. выражение (7.24))

$$\phi(E_\alpha) = 2\kappa_1 b = 2b \sqrt{\frac{2m_\alpha(U_Q - E_\alpha)}{\hbar^2}}. \quad (7.41)$$

Выражение для проницаемости можно уточнить, заменив прямоугольный потенциал, показанный на рис. 7.9, более реалистичным, изображенным на рис. 7.10, где мы пренебрегли шириной граничной области (см. рис. 7.8), которая, как мы отмечали, много меньше и размера ядра, и ширины кулоновского барьера.

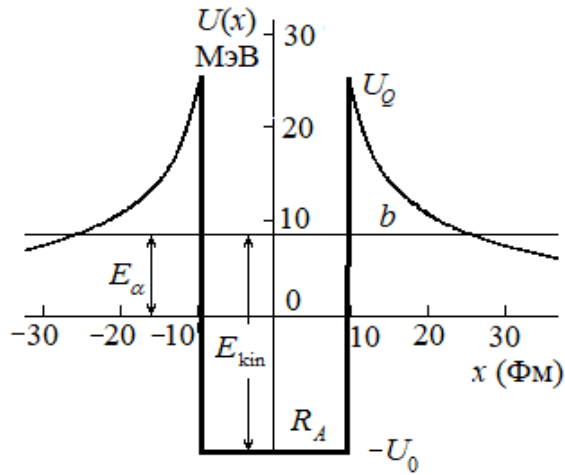


Рис. 7.10. Более реалистичный, по сравнению с изображенным на рис. 7.9, вид потенциальной энергии U . Мы сохранили прямоугольную форму потенциала внутри ядра, а вне ядра потенциал заменили кулоновским. В отличие от изображенной на рис. 7.8 граница ядра здесь резкая, у нее нулевая ширина. E_{kin} – кинетическая энергия частицы внутри ядра

В этом случае имеем

$$K_t \approx \exp[-\phi(E_\alpha)] \equiv \exp\left[-2 \int_{R_A}^{R_A+b} \kappa_1(x) dx\right], \quad (7.42)$$

где

$$\kappa_1(x) = \frac{\sqrt{2m_\alpha}}{\hbar} \sqrt{U(x) - E_\alpha} = \frac{\sqrt{2m_\alpha}}{\hbar} \sqrt{\frac{2Ze^2}{x} - E_\alpha}, \quad (7.43)$$

$$U(x) = \frac{2Ze^2}{x}, \quad U(R_A) = U_Q.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \phi(E_\alpha) &= \frac{2\sqrt{2m_\alpha}}{\hbar} \int_{R_A}^{R_A+b} dx \sqrt{\frac{2Ze^2}{x} - E_\alpha} = \frac{4\sqrt{m_\alpha Ze^2}}{\hbar} \int_{R_A}^{R_A+b} \frac{dx}{\sqrt{x}} \sqrt{1 - \frac{x}{x_0}} = \left(x_0 \equiv \frac{2Ze^2}{E_\alpha} = R_A + b \right) = \\ &= \frac{8\sqrt{m_\alpha Ze^2}}{\hbar} \int_{\sqrt{R_A}}^{\sqrt{R_A+b}} dy \sqrt{1 - \frac{y^2}{x_0}} = \frac{8\sqrt{Ze^2 m_\alpha x_0}}{\hbar} \int_{\frac{\sqrt{R_A}}{\sqrt{x_0}}}^1 d\xi \sqrt{1 - \xi^2} = \frac{8\sqrt{Ze^2 m_\alpha x_0}}{\hbar} \int_{\arcsin \sqrt{R_A/x_0}}^{\pi/2} d\varphi \cos^2 \varphi \approx \\ &\approx (R_A \ll x_0) \approx \frac{2\pi\sqrt{Ze^2 m_\alpha x_0}}{\hbar} \left(1 - \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{E_\alpha}{U_Q}} \right) = \frac{2\pi Ze^2}{\hbar c} \sqrt{\frac{2m_\alpha c^2}{E_\alpha}} \left(1 - \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{E_\alpha}{U_Q}} \right). \end{aligned}$$

В результате, вспоминая, что $e^2/\hbar c = \alpha \approx 1/137$, для постоянной распада имеем

$$\gamma \equiv \frac{1}{\tau} \approx \frac{v_0}{2R_A} e^{-2\pi Z\alpha \sqrt{\frac{2mc^2}{E_\alpha}} \left(1 - \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{E_\alpha}{U_Q}} \right)}. \quad (7.44)$$

Соответственно, время жизни ядра

$$\tau \approx \frac{2R_A}{v_0} e^{2\pi Z\alpha \sqrt{\frac{2mc^2}{E_\alpha}} \left(1 - \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{E_\alpha}{U_Q}} \right)}. \quad (7.45)$$

Для примера и оценки: пусть $E_\alpha \sim 8$ МэВ, $Z = 84$, тогда $2R_A / v_0 \approx 0,3 \cdot 10^{-21}$ с (см. выражение (7.37)), $2\pi Z \alpha \sqrt{2mc^2/E_\alpha} \approx 121$, $\left[1 - (2/\pi) \sqrt{E_\alpha/U_Q}\right] \approx 0,66$; так что экспонента в соотношении (7.45) равна $e^{80} \approx 3 \cdot 10^{34}$. В результате имеем $\tau \approx 10^{13}$ с $\approx 3 \cdot 10^5$ лет. В реальности же из-за экспоненциальной зависимости проницаемости кулоновского барьера времена жизни α -радиоактивных ядер имеют значения в огромном интервале – от $3 \cdot 10^{-7}$ с для ^{212}Po (полоний) до $5 \cdot 10^{15}$ лет для ^{142}Ce (церий) и более. Для ^{209}Bi , например, период полураспада составляет $T_{1/2} = (2,01 \pm 0,08) \cdot 10^{19}$ лет, так что за год в одном грамме природного висмута лишь около 100 ядер испытывают α -распад.

Выражение (7.45) можно переписать в виде

$$\ln \tau = \ln \frac{2R_A}{v_0} - 4\alpha Z \sqrt{\frac{2mc^2}{U_Q}} + 2\pi\alpha Z \sqrt{\frac{2mc^2}{E_\alpha}} \equiv a + b \frac{\alpha Z}{\sqrt{E_\alpha}}.$$

Это закон Гейгера – Неттола. Г. Гейгер и Дж. Неттол установили его эмпирически в 1911 г. и записали в виде

$$\lg T_{1/2} = C + D / \sqrt{E_\alpha}. \quad (7.46)$$

Здесь энергия α -частицы E_α измеряется в мегаэлектронвольтах; период полураспада ядра $T_{1/2}$ – в секундах; $\lg$ – десятичный логарифм; константы C и D не зависят от A и слабо зависят от Z (например, для $Z = 84$, $C = -50,15$, $D = 128,8$; для $Z = 90$, $C = -51,94$, $D = 139,4$).

Теоретическое обоснование закона Гейгера – Неттола было дано в 1928 г. Георгием Гамовым [37], а также независимо Рональдом Герни и Эдвардом Кондоном [38], которые рассмотрели α -распад как туннельный переход. Простыми вычислениями они получили правильную зависимость постоянной распада от кинетической энергии испускаемой α -частицы.

7.5. Квазистационарные состояния

Выражение (7.39)

$$\frac{N}{N_0} = e^{-\gamma t} \equiv e^{-t/\tau}$$

можно интерпретировать как вероятность для каждого атома или ядра через время t остаться в начальном (возбужденном) состоянии $\psi_0(\xi)$ с энергией E_0 , т. е.

$$W(t) = \left| \langle \psi(\xi, 0) | \psi(\xi, t) \rangle \right|^2 = \left| \int \psi^*(\xi, 0) \psi(\xi, t) d\xi \right|^2 = e^{-\gamma t}, \quad t \geq 0, \quad \gamma > 0, \quad (7.47)$$

где

$$\begin{aligned}\psi(\xi, t) &= \psi_0(\xi) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 - i\frac{\Gamma}{2})t}, \quad \gamma = \Gamma / \hbar, \quad \Gamma \ll E_0; \\ \psi(\xi, 0) &= \psi_0(\xi).\end{aligned}\tag{7.48}$$

Состояние $\psi(\xi, t)$ не совсем стационарно, оно медленно, по сравнению с частотой осцилляций $\omega_0 = E_0/\hbar$, затухает, поэтому называется *квазистационарным*. А поскольку его существование ограничено во времени, следовательно, оно обладает некоторым спектром энергий. Представив $\psi(\xi, t)$ в виде суперпозиции состояний с разными энергиями

$$\psi(\xi, t) = \psi_0(\xi) \int C(E) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} dE,\tag{7.49}$$

для $C(E)$ находим

$$C(E) = \int_0^\infty e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 t - i\frac{\Gamma}{2})t} e^{\frac{i}{\hbar}Et} dt = \int e^{i(\omega - \omega_0 + i\frac{\gamma}{2})t} dt = \frac{i}{(\omega - \omega_0) + i\frac{\gamma}{2}}.\tag{7.50}$$

Она имеет смысл амплитуды вероятности найти у состояния (т. е. у вылетевшей частицы) энергию $E = \hbar\omega$. Нормированная плотность вероятности частицы иметь энергию E (спектральная плотность) определяется как

$$\frac{dW}{dE} = B^2 |C(E)|^2,$$

где B находится из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dW}{dE} dE = B^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} = 1,$$

откуда $B^2 = \Gamma/2\pi$ и

$$\frac{dW}{dE} = \frac{\Gamma/2\pi}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}.\tag{7.51}$$

Видим, что энергетическая плотность состояния имеет резкий максимум вблизи E_0 с шириной $\Delta E \sim \Gamma = \hbar/\tau$, которую можно назвать шириной уровня E_0 (рис. 7.11). Она отвечает неопределенности в энергии уровня, соответствующей конечности его времени жизни.

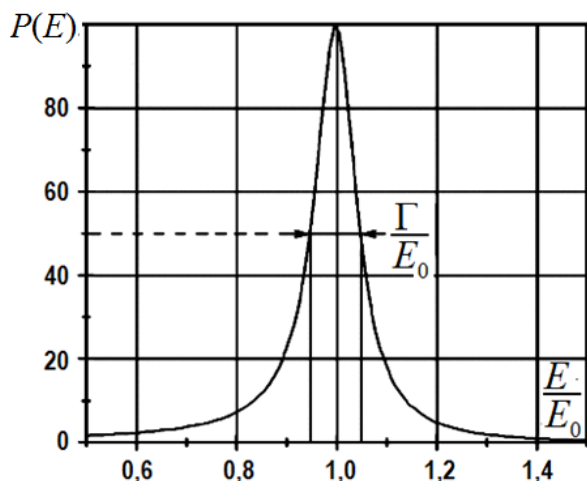


Рис. 7.11. Спектральная кривая, описывающая, например, зависимость интенсивности потока α -частиц от их энергии. Величина Γ есть ширина кривой на половине ее высоты

Следует заметить, что в формуле (7.47) для вероятности распада время t отсчитывается с того момента, когда констатировано, что атом (или система) еще не распался; само же состояние нераспавшегося атома не меняется. Это фактически означает, что атом «не стареет», а распадается внезапно.

На рисунке 7.11 приведен график функции спектральной плотности, нормированной так, чтобы максимальная амплитуда равнялась единице:

$$P(E) = \frac{\pi\Gamma}{2} \frac{dW}{dE} = \frac{\Gamma^2/4}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}. \quad (7.52)$$

Заметим, что при $\Gamma \rightarrow 0$, $dW/dE \rightarrow \delta(E - E_0)$, и наше квазистационарное состояние переходит в стационарное с энергией $E = E_0$.

7.5. Надбарьерное отражение

Вернемся к прохождению частицы через барьер. Рассмотрим случай, когда энергия налетающей слева частицы больше высоты барьера $E > U_0$ (рис. 7.12).

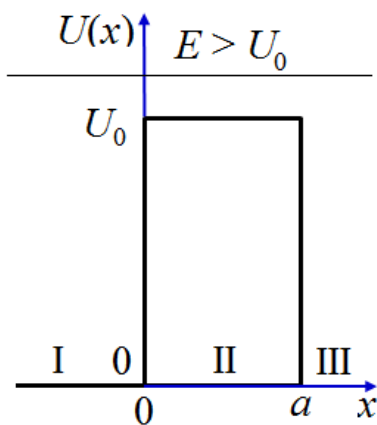


Рис. 7.12. Прохождение частицы через барьер. Энергия налетающей слева частицы больше высоты барьера

По классической теории поток частиц, идущих слева из области I, полностью пройдет через барьер. Область II – классически доступна. В этой области частица замедлится (кинетическая энергия уменьшится), далее ускорится до прежней величины, падая с барьера.

В квантовой же механике, как и ранее, нужно решать уравнение Шредингера, которое в данном случае, в отличие от уравнений (7.13), во всех областях имеет вид *бегущих волн* (поскольку везде волновой вектор веществен):

$$\psi_{\text{III}} = Be^{ikx}, \quad \psi_{\text{I}} = e^{ikx} + Ae^{-ikx}, \quad \psi_{\text{II}} = Ce^{ik_0x} + De^{-ik_0x}, \quad (7.53)$$

где в области II над барьером (или ямой, если $U = -U_0$) кинетическая энергия положительна и волновой вектор k_0 веществен:

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)}. \quad (7.54)$$

Мы уже получили решение, в котором все величины выражались через величину

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)} \equiv \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)} = ik_0.$$

Таким образом, чтобы получить решение при $E > U_0$, необходимо в решении для $E < U_0$ сделать замену $\kappa \rightarrow ik_0$. При этом в амплитуде прошедшей волны произойдет замена $\text{ch } \kappa x \rightarrow \cos k_0 x$, $\text{sh } \kappa x \rightarrow i \sin k_0 x$, так что для амплитуды прошедшей волны получим

$$B = \frac{2e^{-ika}}{2\cos k_0 a - i\left(\frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0}\right)\sin k_0 a}, \quad (7.55)$$

а для коэффициента прохождения $K_t = |B|^2$ –

$$K_t = \frac{4}{4\cos^2 k_0 a + \left(\frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0}\right)^2 \sin^2 k_0 a} = \frac{4k^2 k_0^2}{4k^2 k_0^2 + (k^2 - k_0^2)^2 \sin^2 k_0 a}. \quad (7.56)$$

Этот результат является совершенно замечательным и интересным. Во-первых, мы видим, что при $k_0 = k$, $K_t = 1$. Это естественно, поскольку в этом случае нет скачка потенциала (нет ни ямы, ни барьера). При $k_0 \neq k$ коэффициент прозрачности в общем случае меньше единицы, что указывает на отражение как от барьера, так и от ямы. Это есть результат волновой природы частиц. Однако имеется случай, когда и при $k_0 \neq k$ барьер (или яма) являются совершенно прозрачными, т. е. $K_t = 1$. Это происходит при условии, когда $\sin^2 k_0 a = 0$ или $k_0 a = n\pi$, где $n = 1, 2, 3, \dots$, т. е. при

$$a = n \frac{\lambda_0}{2}, \quad \lambda_0 = \frac{2\pi}{k_0} = \frac{2\pi\hbar}{p_0} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E - U_0)}}. \quad (7.57)$$

Таким образом, чтобы барьер (или яма) были прозрачными для надбарьерной частицы, на ширине барьера (или ямы) должно укладываться целое число полуволн. Заметим, что в случае потенциальной ямы потенциал в области II (в яме) отрицательный: $U = -U_0$, так что выражение (7.57) для длины волны в яме будет содержать $\hbar k_0 = \sqrt{2m(E + U_0)}$.

Для коэффициента отражения из соотношения (7.23) можем написать $R = 1 - K_t$, тогда

$$R = \frac{(k^2 - k_0^2)^2 \sin^2 k_0 a}{4(kk_0)^2 + (k^2 - k_0^2)^2 \sin^2 k_0 a} = \frac{(k^2 - k_0^2)^2 \operatorname{tg}^2 k_0 a}{4(kk_0)^2 + (k^2 + k_0^2)^2 \operatorname{tg}^2 k_0 a}. \quad (7.58)$$

Отсюда, естественно, также следует, что при $k_0 a = n\pi$, $n = 1, 2, 3, \dots$, $R = 0$, т. е. потенциальный барьер (или яма) для частицы полностью прозрачны.

Заметим, что выражение для проницаемости ямы (7.56) имеет *резонансный характер*:

$$K_t = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k} \right)^2 \sin^2 k_0 a}. \quad (7.59)$$

Здесь $\hbar k_0 = \sqrt{2m(E + U_0)}$, $\hbar k = \sqrt{2mE}$, кинетическая энергия частицы в яме больше кинетической энергии налетающей частицы.

Будем считать $k_0/k \gg 1$. Как видно из уравнения (7.59), максимумы K_t возникают при $k_0 a = n\pi$ (рис. 7.13).

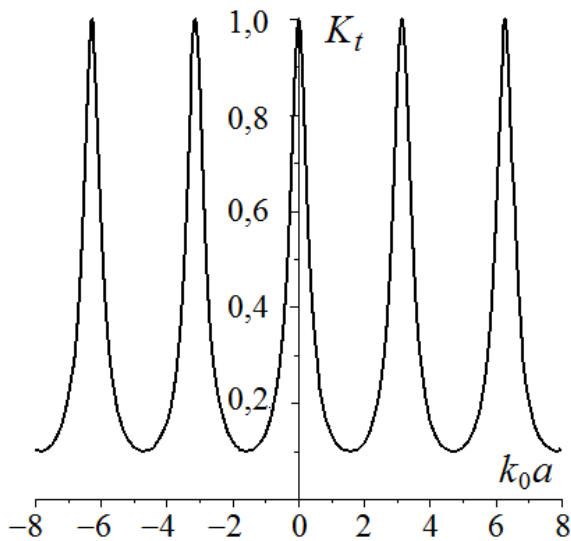


Рис. 7.13. Зависимость коэффициента K_t прозрачности барьера от величины $k_0 a$

Определим ширину по энергии E максимумов кривой на рис. 7.13, т. е. выясним, как далеко от точек $k_0 a = n\pi$ (или при каком изменении энергии) коэффициент K_t уменьшится вдвое. Это, очевидно, произойдет, когда

$$\frac{1}{4} \left(\frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k} \right)^2 \sin^2 k_0 a = 1 \quad (7.60)$$

или при

$$\sin^2 k_0 a = \pm \frac{2}{\left| \frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k} \right|}. \quad (7.61)$$

Если знаменатель велик (в силу $k_0 \gg k$), то $k_0 a$ мало отличается от $n\pi$, т. е.

$$k_0 \approx \frac{n\pi}{a} \pm \frac{2/a}{\left| \frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k} \right|}$$

и

$$\delta k_0 = \frac{\delta p_0}{\hbar} \approx \frac{2}{a} \frac{1}{\left| k/k_0 - k_0/k \right|}. \quad (7.62)$$

Поскольку $\hbar^2 k_0^2 / 2m = E + U_0$, то

$$\delta E = \frac{\hbar^2 k_0}{m} \delta k_0 = \frac{\hbar k_0}{m} \hbar \delta k_0 = v_0 \hbar \delta k_0,$$

так что для энергетической ширины максимума получаем

$$\delta E = \frac{v_0 \hbar}{2a} \frac{4}{\left| k/k_0 - k_0/k \right|} \approx \frac{v_0 \hbar}{2a} K_{t0}, \quad (7.63)$$

где K_{t0} – коэффициент прозрачности барьера для частицы, находящейся внутри ямы на ее границах (см. формулу (7.6) для надбарьерного прохождения при $k_0 \gg k$). Когда величина K_{t0} мала, необходимо $N_0 \approx 1/K_{t0}$ отражений от границы $x = a$, чтобы частица полностью покинула яму. Величина

$$\tau_0 = \frac{2a}{v_0} \frac{1}{K_{t0}} = \frac{2a}{v_0} N_0 \quad (7.64)$$

есть полное время пребывания частицы в яме; $2a/v_0$ – время пролета частицы после отражения от границы в точке $x = a$ до границы $x = 0$ и обратно.

Таким образом, в состояниях с положительными энергиями, определяемыми условиями $k_0 a = n\pi$, частица живет в яме гораздо дольше ее времени пролета через яму. Такие состояния в непрерывном спектре называются *виртуальными*

уровнями, или *потенциальными резонансами*. Их ширины определяются временем жизни:

$$\delta E \approx \frac{\hbar \nu_0}{2a} K_{t_0} = \frac{\hbar \nu_0}{2aN_0} = \frac{\hbar}{\tau_0}. \quad (7.65)$$

7.6. Эффект Рамзауэра

Эффект Рамзауэра (1921) является примером резонанса прозрачности при рассеянии электронов атомами благородных газов, таких как неон и аргон.

Потенциальную энергию электрона в таком атоме приблизительно можно представить в виде прямоугольной ямы шириной порядка $2 \cdot 10^{-8}$ см и с постоянной глубиной U_0 . Для очень медленных электронов, кинетическая энергия которых $\sim 0,1$ эВ, эффективная глубина и ширина ямы таковы, что наблюдается *резонанс прозрачности*. Таким образом, газ оказывается практически прозрачным для электронов с такой скоростью.

Действительно, резонанс возникает при $\lambda_0 = 2a = 4 \cdot 10^{-8}$ см. Такой длине волны отвечает кинетическая энергия в яме (т. е. фактически глубина ямы) ~ 9 эВ, и $k_0/k \sim 10$, т. е. $K_{t_0} \sim 0,4$; $N_0 \sim 2-3$.

Глава 8. Гармонический осциллятор. Квантовая теория

8.1. Вариационный метод приближенных расчетов

Вариационный метод вычисления энергии E_0 основного состояния системы базируется на использовании неравенства

$$E_0 \leq \int \psi^* \hat{H} \psi d\xi, \quad (8.1)$$

где ψ – произвольная функция, удовлетворяющая условию нормировки

$$\int \psi^* \psi d\xi = 1.$$

Действительно, разложив функцию ψ по собственным функциям оператора H

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n,$$

получаем

$$\int \psi^* \hat{H} \psi d\xi = \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = E_0,$$

и чем ближе к истинной волновой функции φ_0 окажется пробная функция ψ , тем ближе к E_0 будет интеграл (8.1).

Таким образом, вычисление энергии основного состояния квантовой системы сводится к вычислению минимума интеграла при варьировании нормированной волновой функции.

Практическое вычисление энергии основного состояния сводится к выбору пробной функции, содержащей некоторое число неизвестных параметров $\alpha, \beta, \dots$. После вычисления интеграла

$$J(\alpha, \beta, \dots) = \int \psi^*(\xi, \alpha, \beta, \dots) \hat{H} \psi(\xi, \alpha, \beta, \dots) d\xi \quad (8.2)$$

определение значений нужных параметров сводится к отысканию минимума интеграла, т. е. к решению системы уравнений

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha} = \frac{\partial J}{\partial \beta} = \dots = 0. \quad (8.3)$$

При удачном выборе вида пробной функции получаемое значение

$$E = J(\alpha_0, \beta_0, \dots) \quad (8.4)$$

будет близко к истинному значению E_0 даже при сравнительно малом числе использованных параметров. Волновая функция основного состояния системы будет приближенно совпадать с функцией $\psi_0(\xi, \alpha_0, \beta_0, \dots)$. Этот метод отыскания энергии основного состояния носит название *прямого вариационного метода*, или *метода Рунца*.

Выбор пробных функций базируется на качественном анализе решений с учетом симметрии задачи. В случае удачного выбора пробной функции хорошие результаты для энергии получаются уже при использовании одного параметра.

8.2. Линейный гармонический осциллятор. Вариационный метод

Задача является очень важной и общей, поскольку, в частности, каждый атом в веществе колеблется около положения равновесия. Поскольку любой потенциал вблизи минимума (т. е. положения равновесия) можно аппроксимировать параболой, то практически любые колебания вблизи положения равновесия можно считать гармоническими.

Гамильтониан одномерного гармонического осциллятора имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (8.5)$$

Мы можем решить уравнение Шредингера

$$H \psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x), \quad (8.6)$$

так как его можно преобразовать в стандартное дифференциальное уравнение Эрмита и найти энергии и волновые функции. Но мы здесь проиллюстрируем, как работает вариационный метод.

Пробная волновая функция основного состояния выбирается из физических соображений о свойствах системы (иными словами, из общего смысла или интуиции). Что мы можем сказать в рассматриваемом случае. В силу симметрии относительно инверсии координат гамильтониана осциллятора волновая функция должна быть четной или нечетной. Кроме того, она в силу нормировки должна убывать на больших расстояниях до нуля, т. е.

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2, \quad \psi(\infty) = \psi(-\infty) = 0. \quad (8.7)$$

Еще волновая функция основного состояния должна быть локализована (иметь максимум) около положения равновесия.

На рисунке 8.1 изображен потенциал гармонического осциллятора

$$U(x) = \frac{1}{2} k x^2 \equiv \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

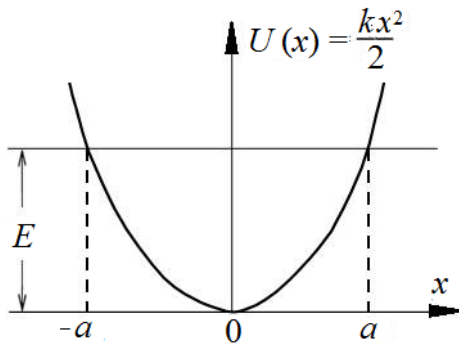


Рис. 8.1. Зависимость потенциальной энергии U гармонического осциллятора от координаты x . Область от $-a$ до a является классически доступной. Классическое основное состояние – частица покоится в точке $x = 0$

Область $|x| > a$ на рис. 8.1 является классически недоступной. При $|x| \gg a$ имеем $U(x) \gg E$, поэтому в уравнении Шредингера (8.6) можно пренебречь E , тогда оно сводится к следующему:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi, \quad (8.8)$$

т. е. каждое дифференцирование приводит к умножению функции на x . Таким свойством обладает функция $\exp(-x^2)$. Поэтому в качестве пробной давайте ее и возьмем:

$$\psi_0(x) = \alpha e^{-\beta x^2}. \quad (8.9)$$

Это функция Гаусса с двумя параметрами. Ее график приведен на рис. 8.2. Она удовлетворяет условиям (8.7).

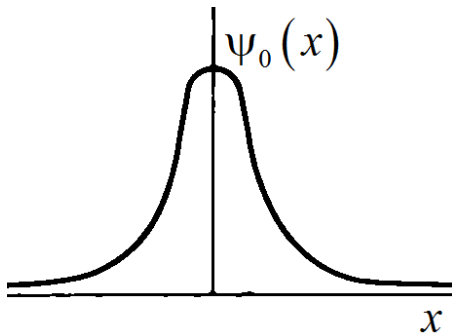


Рис. 8.2. График функции Гаусса (8.9)

Вариационное условие (8.3) будет иметь вид

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) H \psi_0(x) dx = 0. \quad (8.10)$$

Здесь β является вариационным параметром, а коэффициент α находится из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \psi_0(x) dx = \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\beta x^2} dx = \alpha^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\beta}} = 1 \quad (8.11)$$

(см. вычисление к уравнению (6.81)). Он равен

$$\alpha = \left(\frac{2\beta}{\pi} \right)^{1/4}, \quad (8.12)$$

так что

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2\beta}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\beta x^2}. \quad (8.13)$$

Ищем минимум интеграла

$$\begin{aligned} I_0(\beta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) H \psi_0(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\beta}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\beta x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] e^{-\beta x^2} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\beta}{\pi} \right)^{1/2} e^{-2\beta x^2} \left[\beta \frac{\hbar^2}{m} - 2\beta^2 x^2 \frac{\hbar^2}{m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] dx = \beta \frac{\hbar^2}{m} - \beta \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{\beta} \frac{m \omega^2}{8}. \end{aligned} \quad (8.14)$$

Интегралы, содержащие x^2 в соотношении (8.14), берутся по частям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\beta x^2} dx \equiv - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{4\beta} d e^{-2\beta x^2} = - \frac{x}{4\beta} e^{-2\beta x^2} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{4\beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\beta x^2} dx = \frac{1}{4\beta} \left(\frac{\pi}{2\beta} \right)^{1/2}. \quad (8.15)$$

Дифференцируя интеграл (8.14) по параметру и используя условие минимума энергии системы (8.3), получаем

$$\frac{\partial I_0}{\partial \beta} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{1}{\beta^2} \frac{m \omega^2}{8} = 0, \quad (8.16)$$

откуда

$$\beta_0 = \frac{m \omega}{2\hbar}, \quad \alpha_0 = \left(\frac{m \omega}{\hbar \pi} \right)^{1/4}. \quad (8.17)$$

Следовательно, энергия основного состояния, определяемая как

$$E_0 = \min \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) H \psi_0(x) dx \equiv \min I_0(\beta) = \beta_0 \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{\beta_0} \frac{m \omega^2}{8},$$

равна

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad (8.18)$$

а волновая функция основного состояния имеет вид

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m \omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m \omega}{2\hbar} x^2}. \quad (8.19)$$

Из равенств (8.13, 8.15, 8.17) следует, что

$$\overline{x^2} = \frac{1}{4\beta_0} = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (8.20)$$

а эта величина характеризует неопределенность координаты частицы $\overline{\Delta x^2} = \overline{x^2}$ в основном состоянии, с другой стороны – по теореме о вириале имеем

$$\overline{\Delta p^2} = \overline{p^2} = 2m \frac{E_0}{2} = \frac{m\hbar\omega}{2}, \quad (8.21)$$

$$\overline{\Delta p^2 \Delta x^2} = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (8.22)$$

что соответствует минимальной величине в соотношении неопределенностей (4.132), т. е. состояние, описываемое функцией (8.19), имеет минимальные разбросы координат и импульсов.

Рассмотрим теперь первое возбужденное состояние $\psi_1(x)$. Волновая функция этого состояния должна удовлетворять тем же физическим требованиям, что и $\psi_0(x)$, кроме того, она должна быть еще ортогональна $\psi_0(x)$.

Таким образом, имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \psi_1(x) dx = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \psi_1(x) dx = 1 \quad (8.23)$$

и

$$E_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) H \psi_1(x) dx. \quad (8.24)$$

Функция, удовлетворяющая этим условиям, должна быть нечетна по x , чтобы первый интеграл в выражении (8.23) обращался в нуль, т. е., например,

$$\psi_1(x) = \alpha x e^{-\beta x^2}. \quad (8.25)$$

Она изображена на рис. 8.3.

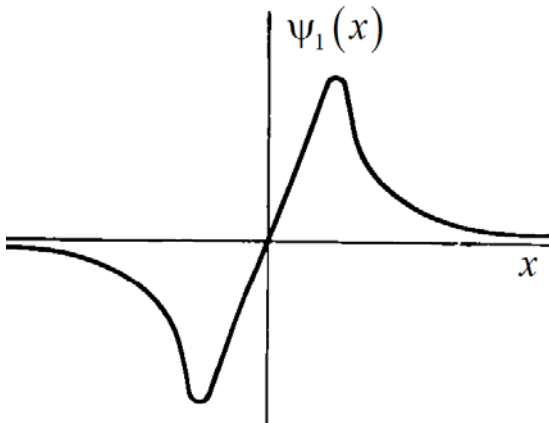


Рис. 8.3. График нечетной функции $\psi_1(x)$; см. формулу (8.22)

Условие, соответствующее минимуму энергии (т. е. интеграла),

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) H \psi_1(x) dx \quad (8.26)$$

в этом случае будет иметь вид

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{3\beta}{2} \frac{\hbar^2}{m} + \frac{3}{8} \frac{m\omega^2}{\beta} \right) = 0, \quad (8.27)$$

так что

$$\beta_1 = \frac{m\omega}{2\hbar}, \quad \alpha_1 = \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/4} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4}. \quad (8.28)$$

В результате

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega, \quad \psi_1(x) = \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/4} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (8.29)$$

Вид волновых функций второго и более высоких возбужденных состояний можно найти, продолжая этот процесс. Каждая последующая волновая функция должна быть нормирована и ортогональна всем предыдущим нижним состояниям. И хотя число условий при этом возрастает, в принципе, этот метод можно распространить на сколь угодно высокие состояния.

Общее решение имеет вид

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \\ \psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} (n! 2^n)^{-1/2} H_n \left[x \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \right] e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (8.30)$$

Здесь $H_n(\xi)$ – полиномы Эрмита. Их вид можно найти в справочниках по специальным функциям.

8.3. Линейный гармонический осциллятор. Представление чисел заполнения

В силу важности этой задачи рассмотрим ее с другой точки зрения. Заметим, что оператор энергии является квадратичной функцией координат и импульсов:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \equiv \hbar\omega \left(\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right).$$

Преобразуем его, не фиксируя пока определенного представления. Введем следующие операторы:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right), \quad (8.31)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right). \quad (8.32)$$

Очевидно,

$$aa^\dagger - a^\dagger a = \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} x\hat{p} + \frac{i}{\hbar} \hat{p}x \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar} x\hat{p} - \frac{i}{\hbar} \hat{p}x \right) = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, x] = 1. \quad (8.33)$$

Также из определения операторов (8.31, 8.32) имеем

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (aa^\dagger + a^\dagger a). \quad (8.34)$$

Введем еще оператор $\hat{N} = a^\dagger a$. Он удовлетворяет следующим перестановочным соотношениям:

$$[a, N] = aa^\dagger a - a^\dagger aa = a, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (8.35)$$

Тогда гамильтониан приводится к виду

$$H = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (8.36)$$

Поскольку наш гамильтониан – оператор положительной величины, собственные значения H не могут быть отрицательными. То есть спектр H ограничен снизу. Кроме того, заранее очевидно, что спектр должен быть чисто дискретным.

Аналогичными свойствами должен обладать и спектр $\hat{N}$. Удобно решать задачу в том представлении, в котором оператор $\hat{N}$ изображается диагональной матрицей. Обозначим через $|n\rangle$ собственный вектор оператора $\hat{N}$, так что

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (8.37)$$

тогда собственные значения энергии будут равны

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (8.38)$$

Подействуем оператором a на состояние $|n\rangle$ и выясним, какими свойствами обладает состояние $a|n\rangle$. Применим к нему оператор N . Получаем

$$\hat{N}a|n\rangle = a^\dagger aa|n\rangle = (aa^\dagger a - a)|n\rangle = an|n\rangle - a|n\rangle = (n-1)a|n\rangle,$$

т. е.

$$a|n\rangle = C_n|n-1\rangle. \quad (8.39)$$

Аналогично, используя соотношения (8.35), имеем

$$\hat{N}a^\dagger|n\rangle = (a^\dagger + a^\dagger\hat{N})|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle$$

и

$$a^\dagger|n\rangle = C'_n|n+1\rangle. \quad (8.40)$$

Таким образом, видим, что оператор a понижает собственное значение оператора $\hat{N}$ на единицу, а оператор $a^\dagger$ повышает его на единицу. Отсюда следует, что, исходя из минимального собственного значения $n_{\min}$, мы можем получить весь спектр $\hat{N}$, последовательно прибавляя единицу. Значение $n_{\min}$ мы определим далее из условия невозможности его понижения с помощью оператора a .

Нетрудно заметить из равенств (8.39) и (8.40), что

$$C_n = \langle n-1|a|n\rangle, \quad C'_n = \langle n+1|a^\dagger|n\rangle, \quad (8.41)$$

а поскольку по определению эрмитова сопряжения $\langle n+1|a^\dagger|n\rangle = \langle n|a|n+1\rangle^*$, то

$$C'_n = C_{n+1}^*. \quad (8.42)$$

Для того чтобы найти C_n , напомним соотношение

$$n = \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n|a^\dagger|n-1\rangle\langle n-1|a|n\rangle = C'_{n-1}C_n = |C_n|^2, \quad (8.43)$$

откуда

$$|C_n| = C_n = \sqrt{n}. \quad (8.44)$$

Мы положили фазу C_n нулем, поскольку она не влияет на физические результаты. В итоге имеем

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (8.45)$$

Рассматривая первое из этих выражений, легко видеть, что процесс понижения собственных значений прекращается лишь в том случае, если среди них есть нуль. Он и является минимальным собственным значением: $n_{\min} = 0$. Таким образом, выясняется, что спектр оператора $\hat{N}$ – целочисленный: $n = 0, 1, 2, \dots$. Собственный вектор $|0\rangle$ основного состояния с $n = 0$ определяется из условия

$$a|0\rangle = 0. \quad (8.46)$$

Соответствующую собственную функцию в координатном представлении легко найти, используя координатное представление (8.31) для оператора a :

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) \psi_0 = 0 \quad (8.47)$$

или

$$\frac{d}{dx} \psi_0 + \frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0 = 0. \quad (8.48)$$

Перепишав формулу (8.48) в виде

$$\frac{d \ln \psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x, \quad (8.49)$$

видим, что

$$\ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \ln B \quad \text{и} \quad \psi_0 = B e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2},$$

где B – произвольная константа. Нормированное решение уравнения (8.48) совпадает с решением уравнения (8.19), которое мы получили ранее:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (8.50)$$

Пользуясь повышающим оператором $a^\dagger$, мы можем выполнить рекуррентное построение всех собственных функций:

$$a^\dagger |0\rangle = \sqrt{1} |1\rangle, \quad a^\dagger |1\rangle = \sqrt{2} |2\rangle, \quad a^\dagger |2\rangle = \sqrt{3} |3\rangle \dots \quad (8.51)$$

В результате

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (8.52)$$

В координатном представлении введем для удобства в оператор

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right)$$

безразмерную переменную

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \equiv \frac{x}{a_0}, \quad (8.53)$$

где a_0 – амплитуда колебаний классического осциллятора (см. равенства (6.104)) с энергией, равной энергии $\hbar\omega/2$ основного состояния квантового осциллятора; она в $\sqrt{2}$ отличается от среднего разброса координаты (8.20) в основном состоянии.

Тогда

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} = -i\hbar \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} = -i\sqrt{m\omega\hbar} \frac{d}{d\xi} = -i\hbar \frac{d}{a_0 d\xi}, \quad (8.54)$$

$$\psi_0(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (8.55)$$

где сохранена нормировка по x , т. е.

$$\int dx |\psi_0(\xi)|^2 = \int d\xi \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{-1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\xi^2} = 1.$$

В результате

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right), \quad (8.56)$$

и для произвольного состояния $|n\rangle$ получаем

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &\equiv \langle \xi | n \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \equiv \\ &\equiv \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \end{aligned} \quad (8.57)$$

где $H_n(\xi)$ – уже упоминавшиеся ранее полиномы Эрмита (см. соотношение (8.30)).

Указание квантового числа n полностью определяет стационарное состояние линейного осциллятора. Поскольку изменение энергии осциллятора происходит порциями, кратными $\hbar\omega$, давайте назовем минимальную порцию (квант) $\hbar\omega$ фононом, основное состояние осциллятора с $n = 0$ – вакуумным состоянием (с нулем фононов), возбужденное состояние с $n = 1$ – однофононным; с $n = 2$ – двухфононным и так далее, т. е. каждый квант возбуждения колебаний осциллятора будет называться *фононом*. Тогда квантовое число n будет определять число фононов в соответствующем состоянии.

Все фононы имеют одинаковую энергию. Стационарное состояние полностью определяется указанием числа фононов.

Таким образом, оператор $\hat{N}$ приобретает смысл оператора числа фононов, а его собственные состояния $|n\rangle$ будут определять так называемое *представление чисел заполнения*.

Операторы $a^\dagger$ и a действуют на состояния, изменяя числа заполнения n (числа фононов). При этом оператор a уменьшает число фононов на единицу и называется *оператором уничтожения фонона*. Оператор $a^\dagger$ увеличивает число фононов на единицу и называется *оператором рождения фонона*.

8.4. Трехмерный осциллятор в декартовой системе координат

В классической теории этот случай отличается от случая линейного осциллятора только тем, что общим типом движения являются не прямолинейные, а, например, эллиптические колебания. Квантовая механика пространственного осциллятора сводится в общем случае (анизотропный осциллятор) к решению уравнения Шредингера вида

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_1^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_2^2 y^2 + \frac{1}{2} m\omega_3^2 z^2 \right] \psi = E\psi \quad (8.58)$$

с граничным условием $\psi = 0$ на бесконечности, т. е. $\psi(x, y, z) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$, $y \rightarrow \infty$, $z \rightarrow \infty$. Если, как это имеет место в настоящем случае, потенциальная энергия U , как и оператор ∇^2 , сводится к сумме членов, каждый из которых содержит только одну координату, то составляющая движения, соответствующая этой координате, может рассматриваться как независимое одномерное движение. Этот результат можно обобщить на случай произвольной системы координат. При этом волновая функция будет произведением одномерных волновых функций аналогично случаю, рассмотренному в разделе 2 (см. выражения (2.58–2.60)).

Действительно, подставляя функцию $\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z)$ в уравнение (8.58), а затем поделив на ψ , получим

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi_x} \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega_1^2 x^2 \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi_y} \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m\omega_2^2 y^2 \right) + \\ & + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi_z} \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} + \frac{1}{2} m\omega_3^2 z^2 \right) = E. \end{aligned} \quad (8.59)$$

Так как x , y и z являются независимыми переменными, то каждый член, заключенный в скобки, должен быть постоянным (в противном случае он зависел бы от переменных других членов, поскольку сумма постоянна, которые в него не входят). Обозначая эти постоянные через E_x , E_y , E_z , мы приходим к трем уравнениям вида (8.6) для трех независимых линейных осцилляторов с энергиями E_x , E_y , E_z , причем $E = E_x + E_y + E_z$, что соответствует аддитивности энергии. Таким образом, используя выражения (8.57) и (8.53), получаем решения уравнения Шредингера (8.58) для трехмерного осциллятора, которые имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = & \left(\frac{1}{\pi^3 a_x^2 a_y^2 a_z^2} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_x + n_y + n_z} n_x! n_y! n_z!}} \times \\ & \times e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{a_x^2} + \frac{y^2}{a_y^2} + \frac{z^2}{a_z^2} \right)} H_{n_x} \left(\frac{x}{a_x} \right) H_{n_y} \left(\frac{y}{a_y} \right) H_{n_z} \left(\frac{z}{a_z} \right), \end{aligned} \quad (8.60)$$

где

$$a_{x_i} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{x_i}}}, \quad x_1, x_2, x_3 \equiv x, y, z. \quad (8.61)$$

Соответственно, энергии трехмерного осциллятора равны

$$E_{n_x n_y n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z. \quad (8.62)$$

В частном случае так называемого изотропного осциллятора при $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ и, соответственно, $a_x = a_y = a_z = a$ формулы (8.60, 8.62) сводятся к

$$\begin{aligned} \Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = & \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{3/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!}} \cdots \times \\ & \times e^{-\frac{r^2}{2a^2}} H_{n_x}\left(\frac{x}{a}\right) H_{n_y}\left(\frac{y}{a}\right) H_{n_z}\left(\frac{z}{a}\right), \end{aligned} \quad (8.63)$$

$$\begin{aligned} E_{n_x n_y n_z} = & \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \equiv \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \\ N = & n_x + n_y + n_z. \end{aligned} \quad (8.64)$$

Как видим, по форме выражение для энергии (8.64) практически совпадает с выражением (8.38) для линейного осциллятора, но имеется существенное отличие. В случае линейного осциллятора различные стационарные состояния (характеризуемые значениями одного квантового числа n) соответствуют различным значениям энергии, т. е. уровни энергии являются невырожденными. В рассматриваемом же случае для получения одного и того же значения энергии, определяемого квантовым числом $N = n_x + n_y + n_z$, есть ряд возможностей выбрать три целых числа n_x, n_y, n_z так, чтобы получить данное целое число N . Это означает, что уровни трехмерного осциллятора вырождены. Например, если основное состояние с $N = 0$ можно получить единственным способом, когда все $n_i = 0$, т. е. оно не вырождено, то уже для первого возбужденного состояния ($N = 1$) может быть три варианта: $n_x = 1, n_y = n_z = 0$; $n_y = 1, n_x = n_z = 0$ и $n_z = 1, n_x = n_y = 0$. Это три различных состояния колебаний, отвечающих движению в направлениях x, y и z соответственно. Они имеют одинаковую энергию, т. е. являются вырожденными. Число вырожденных состояний, принадлежащих к одному уровню энергии, называется *кратностью вырождения этого уровня*. Следовательно, первый возбужденный уровень трехмерного изотропного осциллятора является трижды вырожденным.

Для более высоких возбужденных состояний имеется еще больше комбинаций из трех чисел, сумма которых определяет данный уровень. Можно легко найти число возможных комбинаций трех положительных чисел, составляющих заданное число N и в общем случае. Очевидно, имеется $N + 1$ возможно-

стей выбора первого числа, скажем $r = 0, 1, \dots, N$, второе можно выбрать между 0 и $N - r$, следовательно, для него имеется $N - r + 1$ возможностей, при этом третье число определяется без вариантов. Поэтому кратность вырождения w_N уровня с квантовым числом N равна

$$w_N = \sum_{r=0}^N (N - r + 1) = (N + 1)^2 - \frac{1}{2} N (N + 1) = \frac{1}{2} (N + 1) (N + 2). \quad (8.65)$$

Кратность вырождения нескольких первых уровней показана на рис. 8.4.

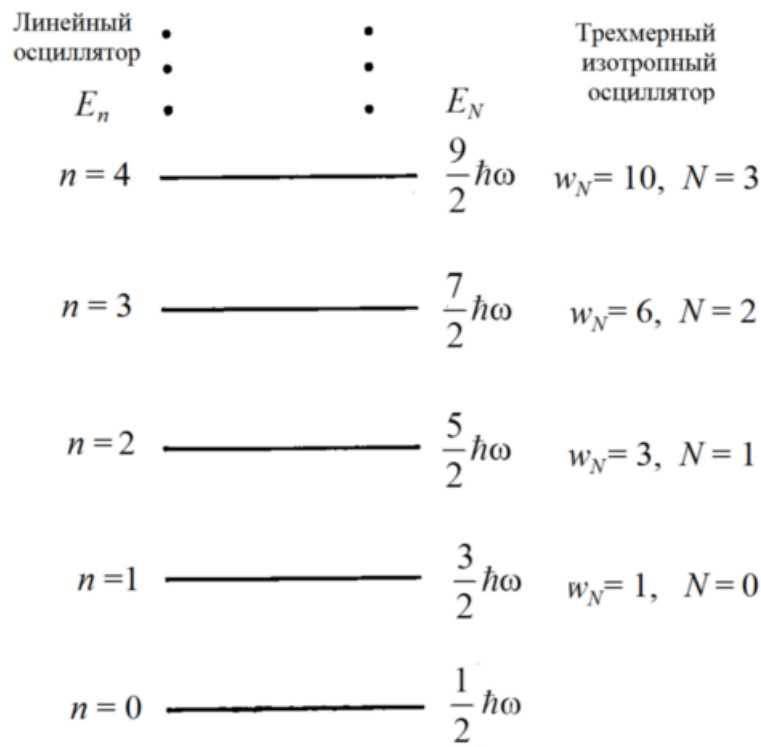


Рис. 8.4. Энергетические уровни гармонического осциллятора: *слева* показаны квантовые числа линейного осциллятора; *справа* – значения его энергий, а также энергии E_N , квантовые числа N и степени вырождения w_N уровней трехмерного изотропного осциллятора

Глава 9. Фононы в одномерном кристалле

9.1. Система связанных осцилляторов и нормальные моды колебаний (классическое рассмотрение)

9.1.1. Колебания двух связанных маятников

Рассмотрим систему двух одинаковых маятников с длинами l и массами m , расположенных на расстоянии a друг от друга и связанных при помощи пружины с жесткостью k_s , как изображено на рис. 9.1. Полагаем, что длины маятников достаточно велики, чтобы считать, что массы перемещаются вдоль оси x . Координаты масс обозначим X_1 и X_2 , тогда их смещения от положений равновесия (равных 0 и a соответственно) будут равны $x_1 = X_1$ и $x_2 = X_2 - a$.

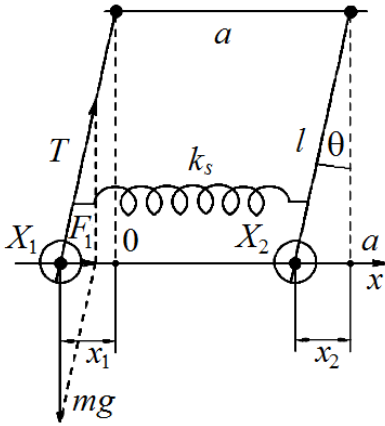


Рис. 9.1. Система двух связанных при помощи пружинки маятников, состоящих из точечных масс, подвешенных на концах жестких невесомых нитей длиной l : T – натяжения нитей; $F_1 = T + mg$ – сила, возвращающая первую массу к положению равновесия. В силу малости углов отклонения θ маятников можно считать силу F_1 направленной по x , а ее величину $F_1 = mg \theta = mgx_1/l$, аналогично для второго маятника $F_2 = mgx_2/l$

При отсутствии связи (пружинки, или что эквивалентно $k_s = 0$) имеем два независимых уравнения движения маятников, которые выглядят так:

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 &= -\omega_0^2 x_1, \\ \ddot{x}_2 &= -\omega_0^2 x_2,\end{aligned}\tag{9.1}$$

где частота колебаний маятников определяется

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{g}{l}}.\tag{9.2}$$

Как мы уже отмечали (см. соотношения (6.102)), пружинке с жесткостью k_s соответствует собственная частота колебаний $\omega_s = (k_s/m)^{1/2}$. При $x_1 \neq x_2$ возникнет добавочная сила от растяжения или сжатия этой пружины, причем эта сила будет возвращающей для обеих масс и равна по величине $k_s|x_2 - x_1|$, где $|x_2 - x_1|$ – изменение длины пружинки, т. е. при наличии связи уравнения становятся такими:

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 &= -\omega_0^2 x_1 + \omega_s^2 (x_2 - x_1), \\ \ddot{x}_2 &= -\omega_0^2 x_2 - \omega_s^2 (x_2 - x_1).\end{aligned}\tag{9.3}$$

Складывая их и вычитая одно уравнение из другого, получим

$$\begin{aligned}\frac{d^2(x_2 + x_1)}{dt^2} &= -\omega_0^2(x_2 + x_1), \\ \frac{d^2(x_2 - x_1)}{dt^2} &= -(\omega_0^2 + 2\omega_s^2)(x_2 - x_1).\end{aligned}\tag{9.4}$$

Результатом явились два новых независимых уравнения, которые описывают независимые колебания величин $(x_1 + x_2)$ и $(x_2 - x_1)$, но уже с разными частотами.

Новые переменные

$$x_c = \frac{x_1 + x_2}{2}, \quad \Delta = \frac{x_1 - x_2}{2}\tag{9.5}$$

называются *нормальными координатами*. Их колебания называются *нормальными модами колебаний*. Уравнения (9.4) в новых координатах приобретают вид

$$\begin{aligned}\frac{d^2 x_c}{dt^2} &= -\omega_1^2 x_c, \\ \frac{d^2 \Delta}{dt^2} &= -\omega_2^2 \Delta.\end{aligned}\tag{9.6}$$

Общее решение этих уравнений нам известно:

$$\begin{aligned}x_c &= a_0 \cos(\omega_1 t + \varphi_1), \\ \Delta &= \Delta_0 \cos(\omega_2 t + \varphi_2).\end{aligned}\tag{9.7}$$

Заметим, что старые координаты, описывающие движение каждого из маятников, являются суперпозициями новых:

$$x_1 = x_c - \Delta, \quad x_2 = x_c + \Delta.\tag{9.8}$$

Таким образом, видим, что каждый из маятников участвует в колебаниях с разными частотами, отвечающими разным модам колебаний.

В рассматриваемом случае нормальные координаты имеют простой физический смысл: x_c есть не что иное, как смещение центра масс двух грузиков относительно средней точки $a/2$. Действительно, при равных массах координата центра масс X_c двух маятников

$$X_c = \frac{m_1 X_1 + m_2 X_2}{m_1 + m_2} = \frac{X_1 + X_2}{2} = \frac{x_1 + x_2}{2} + \frac{a}{2} = x_c + \frac{a}{2}.\tag{9.9}$$

Координата Δ отражает изменение расстояния между грузиками маятника по сравнению с a :

$$2\Delta = x_1 - x_2 = X_1 - X_2 + a.\tag{9.10}$$

На рисунке 9.2 изображена первая (симметричная, мягкая) мода колебаний, когда испытывает колебания лишь положение центра масс, а расстояние между маятниками не меняется: $\Delta = 0$ (координата Δ находится в состоянии покоя).

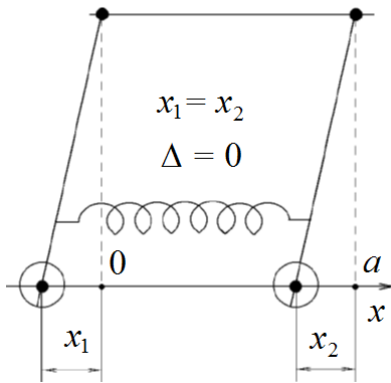


Рис. 9.2. Возбуждена только первая (мягкая) мода колебаний. Изменяется положение центра масс. Расстояние между маятниками постоянно. Маятники колеблются в фазе, пружинка находится в положении равновесия и никак не влияет на колебания. Частота этой моды колебаний совпадает с частотой несвязанных маятников $\omega_1 = \omega_0$

На рисунке 9.3 изображена вторая (антисимметричная, жесткая) мода колебаний, когда испытывает колебания лишь расстояние Δ между маятниками, а их центр масс покоится, его положение неизменно: $x_c = 0$. Жесткость пружинки увеличивает возвращающую силу, действующую на грузики маятников, поэтому частота второй моды колебаний выше частоты несвязанных маятников $\omega_2 = \sqrt{\omega_0^2 + 2\omega_s^2}$. Поэтому говорят, что вторая мода колебаний является более жесткой по сравнению с первой (мягкой) модой.

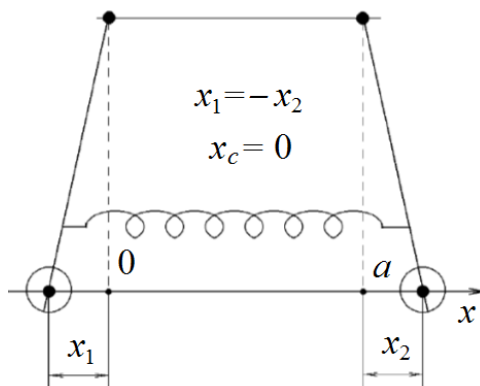


Рис. 9.3. Возбуждена только вторая (жесткая) мода колебаний. Изменяется расстояние Δ между маятниками, положение центра масс постоянно: $x_c = 0$. Маятники колеблются в противофазе $x_1 = -x_2$. Частота этой моды колебаний из-за наличия пружинки выше частоты несвязанных маятников $\omega_2 = \sqrt{\omega_0^2 + 2\omega_s^2}$

Заметим, что задача о двух связанных маятниках очень похожа на задачу о системе с двумя вырожденными уровнями. Как мы видели, любое добавочное взаимодействие приводит к полному перемешиванию уровней: возникают симметричная и антисимметричная комбинации состояний, которые имеют разные энергии. То есть происходит расщепление вырожденного уровня. Точно так же, как в нашей задаче о маятниках, появились симметричная и антисимметричная моды колебаний с разными частотами.

Как мы уже отмечали, потенциальная энергия осциллятора с массой m и частотой ω есть

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

так что полная энергия двух связанных (т. е. взаимодействующих) осцилляторов будет равна

$$E = \frac{m}{2}(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2) + \frac{m\omega_0^2}{2}(x_1^2 + x_2^2) + \frac{m\omega_s^2}{2}(x_2 - x_1)^2. \quad (9.11)$$

Здесь первое слагаемое представляет собой кинетическую энергию двух маятников, второе – их потенциальную энергию, а третье – энергию пружинки, т. е. энергию взаимодействия маятников.

Как нетрудно видеть из определения нормальных координат (9.5),

$$x_c^2 + \Delta^2 = (x_1^2 + x_2^2)/2. \quad (9.12)$$

Поэтому выражение (9.11) для энергии в нормальных координатах принимает вид

$$\begin{aligned} E &= \frac{2m}{2}(\dot{x}_c^2 + \dot{\Delta}^2) + \frac{2m\omega_0^2}{2}(x_c^2 + \Delta^2) + \frac{4m\omega_s^2}{2}\Delta^2 \equiv \\ &\equiv \frac{2m\dot{x}_c^2}{2} + \frac{2m\omega_0^2 x_c^2}{2} + \frac{2m\dot{\Delta}^2}{2} + \frac{2m(\omega_0^2 + 2\omega_s^2)\Delta^2}{2}. \end{aligned} \quad (9.13)$$

Таким образом, путем перехода к нормальным координатам получаем выражение (9.13) для энергии двух независимых осцилляторов с удвоенной массой и разными частотами.

В общем случае каждый из маятников будет участвовать в колебаниях обоих типов. Возбуждение различных мод колебаний определяется начальными условиями. Поскольку разные моды имеют разные частоты, между ними возникают биения, которые приводят к периодическому изменению амплитуд колебаний каждого из маятников.

Для примера: отклоним один из маятников, удерживая другой, а затем отпустим, т. е. начальные условия в таком случае будут выглядеть следующим образом:

$$x_1(0) = x_{10}, x_2(0) = 0; \quad v_1(0) = v_2(0) = 0. \quad (9.14)$$

Общее решение имеет вид

$$\begin{aligned} x_2 &= x_c + \Delta = a_0 \cos(\omega_1 t + \varphi_1) + \Delta_0 \cos(\omega_2 t + \varphi_2), \\ x_1 &= x_c - \Delta = a_0 \cos(\omega_1 t + \varphi_1) - \Delta_0 \cos(\omega_2 t + \varphi_2). \end{aligned} \quad (9.15)$$

Начнем с двух последних начальных условий (9.14). Они дают

$$\begin{aligned}\dot{x}_2(0) &= -a_0\omega_1 \sin \varphi_1 - \Delta_0\omega_2 \sin \varphi_2 = 0, \\ \dot{x}_1(0) &= -a_0\omega_1 \sin \varphi_1 + \Delta_0\omega_2 \sin \varphi_2 = 0.\end{aligned}$$

Складывая эти уравнения, получаем $a_0\omega_1 \sin \varphi_1 = 0$, т. е. при $a_0 \neq 0$ имеем $\varphi_1 = 0$.

Вычитая первое уравнение из второго, точно так же получим, что и $\varphi_2 = 0$.

С учетом этого из первых двух начальных условий следует, что

$$\begin{aligned}x_2(0) &= a_0 + \Delta_0 = 0, \\ x_1(0) &= a_0 - \Delta_0 = x_{10},\end{aligned}\tag{9.16}$$

откуда имеем

$$a_0 = -\Delta_0 = \frac{x_{10}}{2}.\tag{9.17}$$

В результате наше решение приобретает вид

$$\begin{aligned}x_2 &= \frac{x_{10}}{2}(\cos \omega_1 t - \cos \omega_2 t) = x_{10} \sin \frac{(\omega_2 - \omega_1)t}{2} \sin \frac{(\omega_2 + \omega_1)t}{2}, \\ x_1 &= \frac{x_{10}}{2}(\cos \omega_1 t + \cos \omega_2 t) = x_{10} \cos \frac{(\omega_2 - \omega_1)t}{2} \cos \frac{(\omega_2 + \omega_1)t}{2}.\end{aligned}\tag{9.18}$$

Рассмотрим случай, когда маятники связаны слабо, т. е. при $\omega_s \ll \omega_0$, тогда

$$\omega_1 = \sqrt{\omega_0^2 + 2\omega_s^2} = \omega_0 \sqrt{1 + \frac{2\omega_s^2}{\omega_0^2}} \approx \omega_0 \left(1 + \frac{\omega_s^2}{\omega_0^2}\right) = \omega_0 + \frac{\omega_s^2}{\omega_0}\tag{9.19}$$

и

$$\omega_2 - \omega_1 \approx \frac{\omega_s^2}{\omega_0} \ll \omega_s, \quad \omega_2 + \omega_1 \approx 2\omega_0,\tag{9.20}$$

так что

$$\begin{aligned}x_2 &= x_{10} \sin \frac{\omega_s^2 t}{2\omega_0} \cdot \sin \omega_0 t = A_2(t) \sin \omega_0 t, \\ x_1 &= x_{10} \cos \frac{\omega_s^2 t}{2\omega_0} \cdot \cos \omega_0 t = A_1(t) \cos \omega_0 t.\end{aligned}\tag{9.21}$$

Видим, что оба маятника колеблются с одинаковой невозмущенной частотой ω_0 и медленно изменяющимися амплитудами, причем в начальный момент времени, когда мы запустили первый маятник, его амплитуда была x_{10} , амплитуда второго равнялась нулю. Но с течением времени амплитуда колебаний первого маятника постепенно убывает, тогда как амплитуда второго возрастает. Это происходит до тех пор, пока вся энергия первого маятника не перейдет

ко второму маятнику. Далее история повторяется: второй маятник начинает раскачивать первый и т. д. Таким образом будет происходить периодическая перекачка энергии от одного маятника к другому и наоборот. Очень похожие осцилляции происходят и в квантовой системе с двумя уровнями, которые мы обсудили в разделе 3.5. В частности, такая ситуация имеет место при дифракции частиц или рентгеновских лучей в совершенных кристаллах, где происходит периодическая перекачка между прямым и дифрагированным пучками, которую так и называют – *маятниковый эффект*.

9.1.2. Колебания струны

Под струной длиной L мы будем понимать систему N точечных грузиков (атомов), расположенных на расстоянии $a = L/N$ друг от друга на натянутой невесомой нити (например, цепочка атомов в кристалле), как изображено на рис. 9.4.

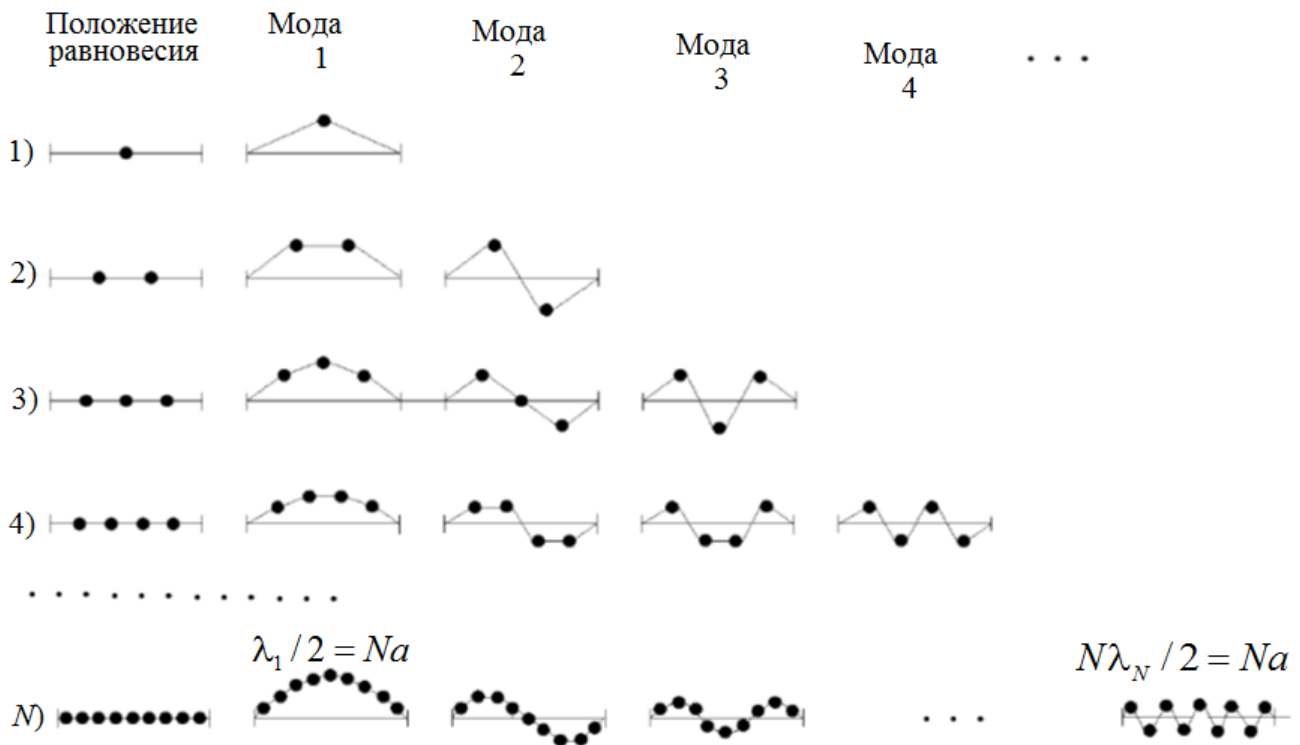


Рис. 9.4. Колебания масс, прикрепленных к натянутой нити. С увеличением их числа приходим к колебаниям одномерной струны. Число мод колебаний совпадает с количеством масс, поскольку число координат (степеней свободы) не изменяется

Начнем рассмотрение с одного грузика посередине нити. В этом случае при малом отклонении грузика в вертикальном направлении (см. строку 1 на рис. 9.4) возвращающая сила будет

$$F = -T \sin \theta = -\frac{T}{L}u \equiv -ku,$$

где T – натяжение нити; $k = T/L$ – поперечная упругая константа (жесткость); $\omega_1 = (T/Lm)^{1/2}$. Далее добавим еще один грузик (строка 2 на рис. 9.4), получим систему, аналогичную двум связанным маятникам. Имеем две моды колебаний: колебания центра масс (грузики колеблются в фазе) и колебания в противофазе, когда центр масс остается на месте, причем эта мода более жесткая, поскольку возвращающая сила больше (смещение происходит на расстоянии $\sim L/2$, а не L , как в случае первой моды).

Постепенно увеличивая число грузиков на нити, придем к картине, изображенной в строке N рис. 9.4, где число мод колебаний совпадает с числом грузиков, причем жесткость моды (частота колебаний) увеличивается с ростом номера моды в силу уменьшения расстояния, на котором происходят смещения масс (атомов). Каждый атом будет участвовать в колебаниях, принадлежащих всем модам, с разными частотами. Положение n -го атома в цепочке будем описывать координатой x_n . Обозначив через u_i смещение атома, обусловленное его участием в i -й моде колебаний с частотой ω_i , для n -го атома можем написать

$$\begin{aligned} u_i(x_n, t) &= u_{0i} \sin \frac{2\pi x_n}{\lambda_i} \sin \omega_i t \equiv u_{0i} \sin k_i x_n \sin \omega_i t = \\ &= \frac{u_{0i}}{2i} \sin \omega_i t \left[e^{ik_i x_n} - e^{-ik_i x_n} \right] \equiv U_q(\omega, t) e^{ikx} + U_q^*(\omega, t) e^{-ikx}. \end{aligned} \quad (9.22)$$

В результате получили совокупность бегущих по цепочке в разных направлениях волн с частотами ω , которые возрастают с уменьшением длины волны λ (т. е. с увеличением волнового вектора k). Как мы увидим ниже при $\lambda \gg d$, $\omega = sk$, где s – скорость звука (упругой волны).

9.2. Упругие волны в кристалле

При помощи одной координаты можно описать смещение не только отдельных атомов, но и плоскостей кристалла из положения равновесия. Такая задача также носит одномерный характер. Для каждого волнового вектора $\mathbf{k}$ в этом случае имеется три типа решений: одно решение с продольной поляризацией (рис. 9.5а), когда смещения плоскостей перпендикулярны самим плоскостям, и два – с поперечной поляризацией (рис. 9.5б), когда смещения параллельны плоскостям.

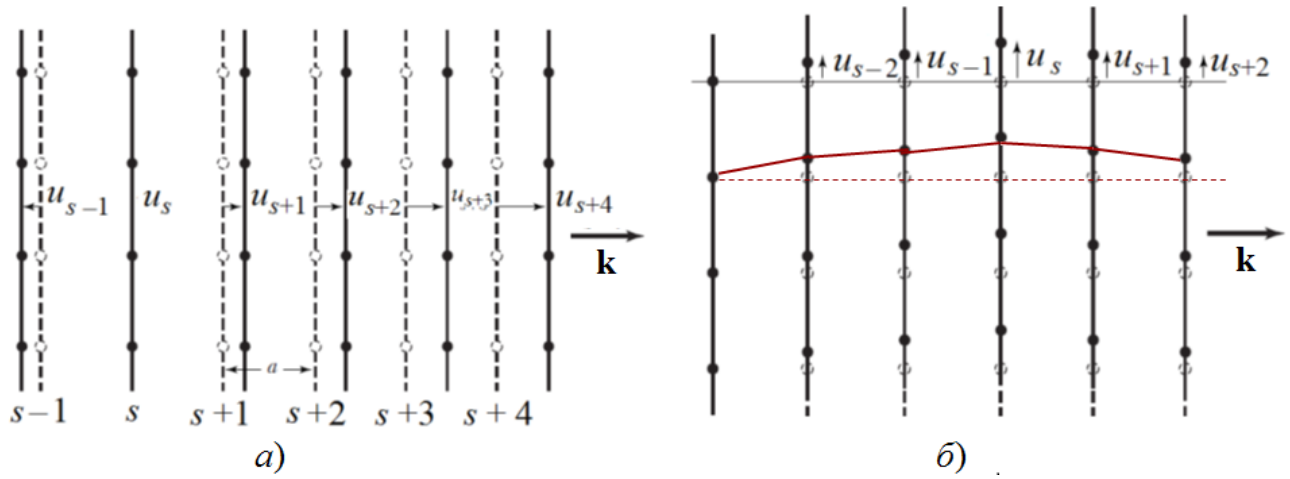


Рис. 9.5. Продольные (а) и поперечные (б) колебания плоскостей (которые нумеруются целым числом s) около положений равновесия в кристалле. Поперечные колебания могут происходить в двух направлениях: в плоскости рисунка, как изображено *справа*, или перпендикулярно этой плоскости. Величина u_s представляет собой смещение s -й плоскости от ее положения равновесия

Мы предполагаем, что сила, действующая на плоскость s , вызванная смещением плоскости $s+p$, является упругой, т. е. пропорциональна разности $u_{s+p} - u_s$ их смещений. Для краткости будем рассматривать только наиболее существенные взаимодействия с ближайшими соседями: $p = \pm 1$. Суммарная возвращающая сила, действующая на плоскость s от плоскостей $s \pm 1$ (закон Гука), –

$$F_s = \gamma(u_{s+1} - u_s) + \gamma(u_{s-1} - u_s). \quad (9.23)$$

Силовая (упругая) константа γ будет разной для продольных и поперечных волн. В дальнейшем удобно рассматривать γ , отнесенную к одному атому плоскости, так, что F_s – это сила, действующая на один атом в s -й плоскости. Тогда уравнение движения атома в этой плоскости s будет иметь вид

$$m \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \gamma(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s). \quad (9.24)$$

Будем искать решение, зависящее от времени, как $u_s \sim \exp(-i\omega t)$, тогда уравнение (9.24) переходит в

$$-m\omega^2 u_s = \gamma(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s). \quad (9.25)$$

Это уравнение в конечных разностях для смещений u_s , оно похоже на дифференциальное, поэтому попробуем искать решения в виде бегущей волны:

$$u_{s \pm 1} = u e^{i(s \pm 1)Ka} = u e^{isKa} e^{\pm iKa}, \quad (9.26)$$

где a – расстояние между плоскостями; K – волновой вектор (a различно для разных направлений K). Подставляя соотношение (9.26) в уравнение (9.25), получим

$$-m\omega^2 u e^{isKa} = \gamma \left(u e^{i(s+1)Ka} + u e^{i(s-1)Ka} - 2u e^{isKa} \right).$$

Для $u \neq 0$ (условие существования ненулевого решения). Сокращая в обеих частях уравнения $u \exp(isKa)$, получим

$$-m\omega^2 = \gamma (e^{iKa} + e^{-iKa} - 2) = 2\gamma (\cos Ka - 1). \quad (9.27)$$

Выражение (9.27) есть не что иное, как уравнение дисперсии (которое описывает связь $\omega(K)$ между частотой и волновым вектором) для полученной волны, распространяющейся вдоль цепочки:

$$u_s = u e^{-i\omega t - iKsa} \equiv u e^{-i\omega t - iKx}, \quad x = sa. \quad (9.28)$$

Его можно представить в виде (обозначив массу атома как M)

$$\omega^2 = \frac{2\gamma}{M} (1 - \cos Ka) = \frac{4\gamma}{M} \sin^2 \frac{Ka}{2} \quad (9.29)$$

или

$$\omega = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}} \left| \sin \frac{Ka}{2} \right|. \quad (9.30)$$

На рисунке 9.6 представлен вид дисперсионной кривой.

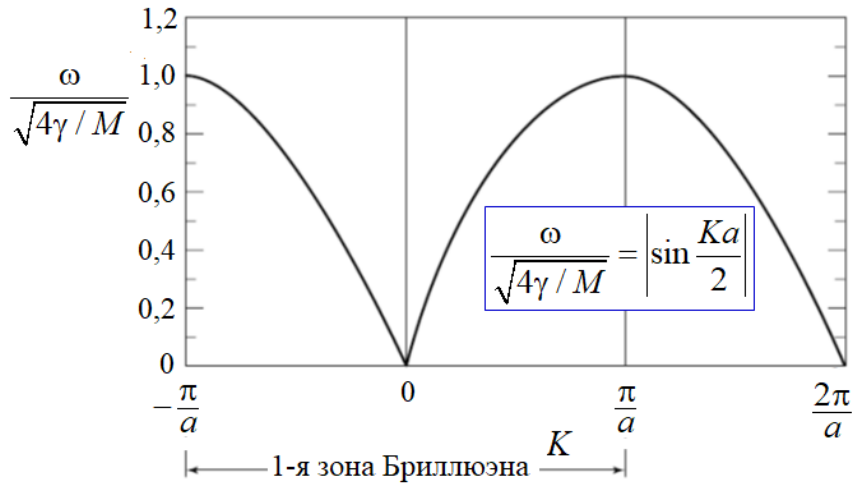


Рис. 9.6. Дисперсионная кривая зависимости $\omega \sqrt{M/4\gamma} = \left| \sin(Ka/2) \right|$. Область изменения волнового вектора K от $-\pi/a$ до $+\pi/a$ называется первой зоной Бриллюэна

Заметим, что $\omega(0) = 0$. Таким свойством обладают так называемые *акустические колебания*. Область $K \ll 1/a$ (или $\lambda \gg a$) соответствует так называемому *континуальному приближению* (сплошная среда), здесь дискретная структура цепочек атомов несущественна. В этом случае из равенства (9.30) имеем

$$\omega = \sqrt{\frac{a^2 \gamma}{M}} K = sK, \quad s = \sqrt{\frac{a^2 \gamma}{M}}, \quad (9.31)$$

где s – скорость звука в сплошной среде. При линейном законе дисперсии фазовая и групповая скорости совпадают: $v_\phi = v_g = s$ (см. выражения (2.13, 2.21)).

9.2.1. Зоны Бриллюэна

Спрашивается, какая область значений K имеет физический смысл для рассматриваемых упругих волн (фононов) в кристалле. Рассмотрим отношения смещений соседних плоскостей. Имеем

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = \frac{ue^{i(s+1)Ka}e^{-i\omega t}}{ue^{isKa}e^{-i\omega t}} = e^{iKa}. \quad (9.32)$$

Область значений фазы Ka от $-\pi$ до $+\pi$ включает все независимые значения этого отношения. Поскольку волны могут распространяться и вправо, и влево, то область всех независимых K можно определить как $-\pi \leq Ka \leq \pi$ или

$$-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}. \quad (9.33)$$

Эта область значений K называется *первой зоной Бриллюэна* линейной решетки.

Предельные значения K на границах зоны равны

$$K_{\max} = \pm \frac{\pi}{a} \quad (9.34)$$

и имеют значения порядка 10^8 см^{-1} , поскольку минимальные расстояния между атомами в веществе имеют порядок 10^{-8} см .

Если K лежит вне пределов первой зоны, в этом случае имеется соответствующий вектор

$$K' = K - \frac{2\pi n}{a}, \quad n - \text{целое число}, \quad (9.35)$$

который находится внутри этой зоны, так что будем иметь

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = e^{iKa} \equiv e^{i2\pi n} e^{iKa - i2\pi n} \equiv e^{iK'a}, \quad (9.36)$$

поскольку $\exp(i2\pi n) = 1$.

Таким образом, все смещения могут быть описаны волновым вектором внутри первой зоны (который может быть получен вычитанием соответствующего так называемого *вектора обратной решетки* $G = 2\pi n/a$). На рисунке 9.7 показаны две волны с разными волновыми векторами, изображающие одинаковые смещение атомов в кристалле.

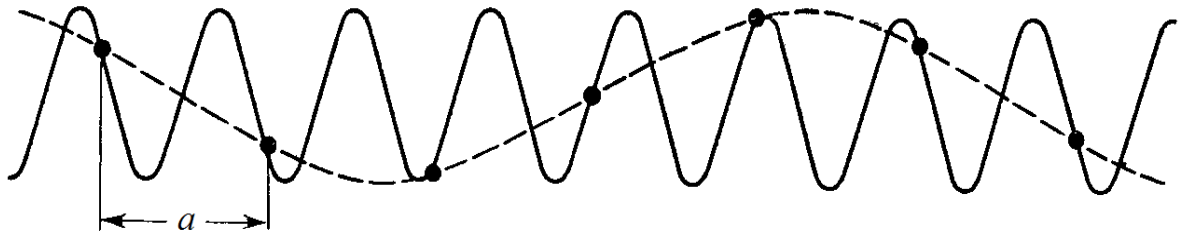


Рис. 9.7. Волна, представленная *сплошной кривой*, не содержит никакой дополнительной информации о смещениях атомов по сравнению с волной, заданной *пунктирной кривой*. Для представления реального движения атомов необходимы только длины волн больше $2a$

Заметим, что на границе зоны решение имеет вид

$$u_s = u \exp(isK_{\max} a) = u \exp(\pm is\pi) = u(-1)^s, \quad (9.37)$$

т. е. становится не бегущей, а стоячей волной. Этот факт отражается также и в величине групповой скорости, которая, как следует из равенств (9.30, 9.31), определяется как

$$v_g = \frac{d\omega}{dK} = s \cos \frac{Ka}{2} \quad (9.38)$$

и обращается в нуль на границах зоны Бриллюэна при $Ka = \pm\pi$.

9.3. Колебания атомов в одномерном кристалле (квантовая теория)

Пусть кристалл состоит из конечного числа N одинаковых нейтральных атомов массы m , равновесные положения которых определяются вектором $\mathbf{n}$:

$$\mathbf{n} = n\mathbf{a}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N,$$

где a – расстояние между соседними равновесными положениями атомов, длина всей цепочки атомов будет равна $L = Na$.

Направим ось x вдоль вектора $\mathbf{a}$ и обозначим через u_n смещение из равновесного положения атома, занимающего узел $\mathbf{n}$. При учете взаимодействия только соседних атомов потенциальная U и кинетическая T энергии колебаний атомов будут равны

$$U = \frac{\gamma}{2} \sum_n (u_n - u_{n-a})^2, \quad T = \frac{m}{2} \sum_n \dot{u}_n^2. \quad (9.39)$$

Для упрощения вычислений введем циклические граничные условия

$$u_n = u_{n+Na}. \quad (9.40)$$

От смещений отдельных атомов перейдем к нормальным координатам A_k , которые определим с помощью преобразования

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k A_k e^{ikn}, \quad A_k = A_{-k}^* \quad (\text{из вещественности } u_n), \quad (9.41)$$

где суммирование выполняется по всем N значениям волнового вектора $\mathbf{k}$, которые определяются из условий цикличности (9.40), которые с учетом выражений (9.41) могут быть записаны как

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}} = e^{i(\mathbf{k}\mathbf{n} + \mathbf{k}N\mathbf{a})}$$

или

$$\mathbf{k}N\mathbf{a} = 2\pi\kappa, \quad \kappa = 0, \pm 1, \dots, \pm(N/2 - 1), +N/2. \quad (9.42)$$

Поскольку вектор $\mathbf{k}$ направлен вдоль цепочки атомов (т. е. вдоль $\mathbf{n}$), то можем написать

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi\kappa}{Na^2} \mathbf{a} \equiv \frac{2\pi\kappa}{Na} \frac{\mathbf{a}}{a}, \quad \kappa = 0, \pm 1, \dots, +N/2. \quad (9.43)$$

Таким образом, величина k лежит в пределах

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}. \quad (9.44)$$

Для длин волн из соотношений (9.43) следует, что

$$\lambda_{\kappa} = \frac{2\pi}{k} = \frac{Na}{|\kappa|}, \quad (9.45)$$

т. е. $\lambda_1 = Na, \dots, \lambda_{N/2} = 2a$. Из-за условий цикличности на длине L всего кристалла, $L = Na$, должно укладываться целое число длин волн (а не полуволен, в отличие от изображенных на рис. 9.4, где мы в качестве граничных условий использовали закрепленные концы струны: $u_n = u_{n+Na} = 0$).

Используя условия ортогональности экспонент

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{n}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')} = \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'}, \quad (9.46)$$

можно найти преобразование, обратное (9.41), выразив нормальные координаты через смещения отдельных атомов. Для этой цели умножим обе части равенства (9.41) на $\exp(-i\mathbf{k}'\mathbf{n}) / \sqrt{N}$ и просуммируем по $\mathbf{n}$ с использованием соотношений (9.46), получим

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{n}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{n}} A_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n} - i\mathbf{k}'\mathbf{n}} = A_{\mathbf{k}'}$$

и

$$A_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{n}}. \quad (9.47)$$

Нормальные координаты $A_{\mathbf{k}}$ характеризуют коллективные колебательные состояния (моды) с частотой $\omega_{\mathbf{k}}$ всех атомов кристалла.

Подставляя равенство (9.41) в выражения (9.39) для потенциальной энергии, получим

$$\begin{aligned}
 U &= \frac{\gamma}{2} \sum_{\mathbf{n}} (u_{\mathbf{n}} - u_{\mathbf{n}-\mathbf{a}})^2 = \frac{\gamma}{2N} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}} (1 - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}}) A_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{n}} (1 - e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{a}}) = \\
 &= \frac{\gamma}{2} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}} (1 - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}}) (1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}} 4\gamma \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \equiv \frac{m}{2} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}^2. \quad (9.48)
 \end{aligned}$$

Здесь мы использовали соотношение (9.46) в виде

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{n}(\mathbf{k} + \mathbf{k}')} = \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}$$

и положили аналогично равенству (9.30)

$$m \omega_{\mathbf{k}}^2 \equiv 4\gamma \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2}, \quad \omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{4\gamma}{m}} \left| \sin \frac{\mathbf{k}\mathbf{a}}{2} \right|. \quad (9.49)$$

Значение $\mathbf{k} = 0$ соответствует смещению всего кристалла как целого, поскольку при этом $\omega_{\mathbf{k}} = 0$ (акустические колебания). Оно не приводит к изменению энергии (трансляционная инвариантность).

Для кинетической энергии аналогично имеем

$$T = \frac{m}{2} \sum_{\mathbf{n}} \dot{u}_{\mathbf{n}}^2 = \frac{m}{2N} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \dot{A}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}} \dot{A}_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{n}} = \frac{m}{2} \sum_{\mathbf{k}} \dot{A}_{\mathbf{k}} \dot{A}_{-\mathbf{k}}. \quad (9.50)$$

Таким образом, опять получили набор независимых осцилляторов с частотами $\omega_{\mathbf{k}}$, только их координаты $A_{\mathbf{k}}$ в общем случае комплексны. Сделаем еще одно упрощение. Будем считать, что $u_{\mathbf{n}} = u_{-\mathbf{n}}$ (это можно сделать, например, выбором начала координат), тогда все $A_{\mathbf{k}}$ станут вещественными. Вводя еще соответствующие обобщенные импульсы

$$P_{\mathbf{k}} = m \dot{A}_{\mathbf{k}} = m \dot{A}_{-\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} m \dot{u}_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} p_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}}, \quad (9.51)$$

выражение для полной энергии запишем в виде

$$H = T + U = \sum_{\mathbf{k}} \frac{P_{\mathbf{k}}^2}{2m} + \frac{m \omega_{\mathbf{k}}^2}{2} A_{\mathbf{k}}^2, \quad (9.52)$$

представляющем собой сумму энергий независимых (невзаимодействующих) осцилляторов.

Для перехода к квантово-механическому описанию такой системы нужно перейти от величин смещений и импульсов к соответствующим операторам. Для координат атомов и их импульсов мы имеем

$$[\hat{u}_{\mathbf{n}}, \hat{p}_{\mathbf{n}'}] = i\hbar \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'}, \quad (9.53)$$

так что

$$[\hat{A}_{\mathbf{k}}, \hat{P}]_{\mathbf{k}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} (\hat{u}_{\mathbf{n}} \hat{p}_{\mathbf{n}'} - \hat{p}_{\mathbf{n}} \hat{u}_{\mathbf{n}'}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{n}'} = \frac{i\hbar}{N} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{n}'} = i\hbar \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (9.54)$$

т. е. операторы наших обобщенных координат и импульсов удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, и точно так же, как и ранее, можно ввести операторы рождения и уничтожения фононов с волновым вектором $\mathbf{k}$:

$$\hat{b}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar}} \hat{A}_{\mathbf{k}} + i \frac{\hat{P}_{\mathbf{k}}}{\sqrt{m\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} \right), \quad \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar}} \hat{A}_{\mathbf{k}} - i \frac{\hat{P}_{\mathbf{k}}}{\sqrt{m\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} \right). \quad (9.55)$$

Для обратного преобразования имеем

$$\hat{A}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\mathbf{k}}}} (\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}), \quad \hat{P}_{\mathbf{k}} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} (\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} - \hat{b}_{\mathbf{k}}), \quad (9.56)$$

так что оператор Гамильтона приобретает вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}(k \neq 0)} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) = \sum_{\mathbf{k}(k \neq 0)} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{N}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right). \quad (9.57)$$

Если ввести числа фононов $v_{\mathbf{k}} = 0, 1, \dots$, т. е. числа заполнения квантовых состояний каждого осциллятора (собственные значения операторов $\hat{N}_{\mathbf{k}}$), то в представлении чисел заполнения функцию колебательного состояния кристалла можно записать в виде $|\dots v_{\mathbf{k}} \dots v_{\mathbf{k}'} \dots\rangle$. Введем краткое обозначение:

$$|v_{\mathbf{k}}\rangle \equiv |0, 0, \dots, 0, v_{\mathbf{k}}, 0, \dots, 0\rangle, \quad (9.58)$$

тогда действие операторов рождения и уничтожения в соответствии с правилами коммутации будет определяться следующим образом:

$$\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} |v_{\mathbf{k}}\rangle = \sqrt{v_{\mathbf{k}} + 1} |v_{\mathbf{k}} + 1\rangle, \quad \hat{b}_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}\rangle = \sqrt{v_{\mathbf{k}}} |v_{\mathbf{k}} - 1\rangle. \quad (9.59)$$

С их помощью, как и ранее, нетрудно получить

$$\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}\rangle \equiv \hat{N}_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}\rangle = v_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}\rangle, \quad (9.60)$$

т. е., действительно, $\hat{N}_{\mathbf{k}}$ можно назвать оператором числа фононов типа $\mathbf{k}$.

Основное состояние кристалла (все $v_{\mathbf{k}} = 0$) описывается функцией $|0\rangle$. В этом состоянии энергия кристалла (энергия нулевых колебаний, или энергия вакуума) не равна нулю:

$$E_0 = \langle 0 | H | 0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}(k \neq 0)} \hbar\omega_{\mathbf{k}}. \quad (9.61)$$

Эта энергия конечна в силу ограниченности числа атомов и, соответственно, числа возможных значений $\mathbf{k}$ в кристалле. При переходе к непрерывному пределу эта энергия неограниченно возрастает.

Функция $|v_k\rangle$ -состояния с v_k -фононами, имеющих волновой вектор $\mathbf{k}$, может быть получена путем последовательного применения оператора рождения фононов к функции нулевого (вакуумного) состояния $|0\rangle$:

$$|v_k\rangle = (v_k!)^{-1/2} (b_k^\dagger)^{v_k} |0\rangle. \quad (9.62)$$

В состоянии $|v_k\rangle$ энергия кристалла равна

$$E_{v_k} = E_0 + v_k \hbar \omega_k. \quad (9.63)$$

Заметим, что оператор смещения атома (т. е. его координаты) имеет вид

$$\hat{u}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \hat{A}_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}} = \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_k}} (\hat{b}_k + \hat{b}_k^\dagger) e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}}. \quad (9.64)$$

Поскольку взаимодействие любой частицы при движении в кристалле с его атомами зависит от положений (т. е. и смещений) атомов, то оператор такого взаимодействия будет содержать операторы рождения и уничтожения фононов, что приведет к рождению (возбуждению) этой частицей фононов и их поглощению.

Также следует заметить, что, хотя $\hbar \omega_k$ – энергия фонона с волновым вектором $\mathbf{k}$, $\hbar \mathbf{k}$ не является истинным импульсом фонона, поскольку его волновой вектор определен в первой зоне Бриллюэна с точностью до вектора обратной решетки $\mathbf{G}$, который направлен перпендикулярно системе плоскостей (вдоль цепочек атомов, т. е. в том же направлении, что и $\mathbf{k}$) и равен по величине $G = 2\pi n/a$. Величина $\hbar \mathbf{k}$ аналогична квазиимпульсу электрона в кристалле. Поэтому законы сохранения энергии и импульса, например при испускании или поглощении фонона летящей в кристалле с энергией E_1 и импульсом $\mathbf{p}_1$ частицей, будут иметь вид

$$\begin{aligned} E_1 &= E_2 \pm \hbar \omega, \\ \mathbf{p}_1 &= \mathbf{p}_2 \pm \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{G}, \end{aligned} \quad (9.65)$$

где E_2 и $\mathbf{p}_2$ – конечные энергия и импульс частицы; $\mathbf{G}$ выбирается так, чтобы $\mathbf{k}$ лежал в первой зоне Бриллюэна. Такой процесс называют еще *неупругим рассеянием частицы* (например, нейтрона) на кристалле с испусканием или поглощением фонона.

9.4. Неупругое рассеяние нейтронов на фононах. Дисперсионные кривые

Дисперсионные соотношения (9.31) или (9.49) для фононов, т. е. зависимость $\omega(k)$, чаще всего определяются экспериментально из неупругого рассеяния нейтронов кристаллами с испусканием или поглощением фонона. Нейтрон «видит» кристаллическую решетку главным образом за счет своего сильного взаимодействия с ядрами. Столкнувшись с ядром, нейтрон может передать часть энергии ядру и тем самым возбудить фонон, а если ядро движется, то и получить от него энергию, т. е. поглотить фонон.

Кинематика рассеяния нейтронов кристаллической решеткой описывается общими законами сохранения энергии и импульса (9.65).

Чтобы определить дисперсионное соотношение, необходимо в эксперименте найти *прирост* или *потерю энергии* рассеянных нейтронов в зависимости от направления вектора рассеяния (переданного импульса) $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$.

Примеры экспериментальных дисперсионных кривых акустических фононов для различных направлений $\mathbf{k}$ в кубическом кристалле натрия, полученных на трехосном нейтронном спектрометре [40], приведены на рис. 9.8.

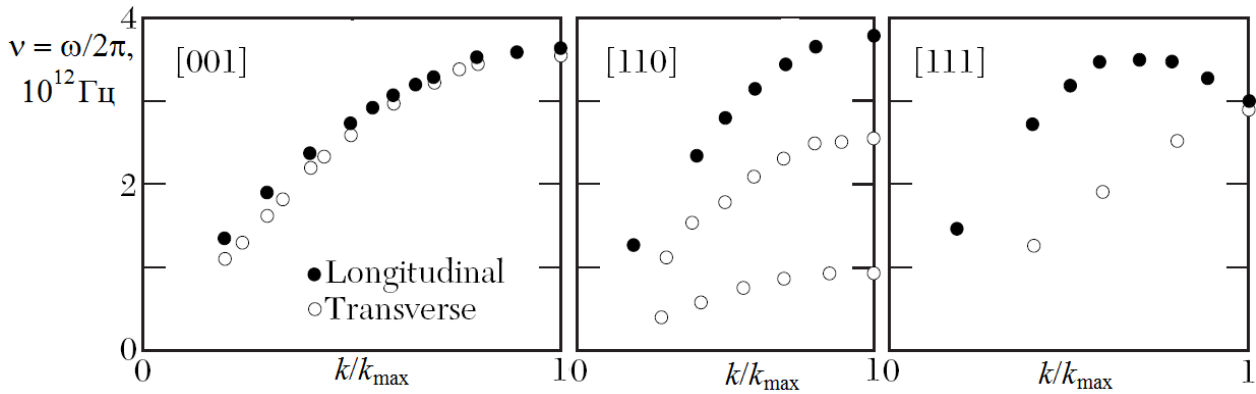


Рис. 9.8. Экспериментальные точки, определяющие кривые дисперсии $\omega(k)$ для продольных (L) и поперечных (T) фононов в Na при температуре 90 К в направлениях [001], [110] и [111] из неупругого рассеяния нейтронов; $k_{\max} = \pi/d$, где d различны для разных направлений

Напомним, что координаты $\mathbf{r}_n$ любого атома в кристалле можно задать тремя целыми числами n_1, n_2, n_3 :

$$\mathbf{r}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3,$$

где $\mathbf{a}_i$ называются *векторами решетки* (или *векторами трансляций*). Для кубического кристалла все они перпендикулярны друг другу и образуют элементарную ячейку в форме куба со стороной a . Направление в кристалле также можно задать направлением вектора $\mathbf{r}_n$, т. е. теми же числами. Оно обозначается квадратными скобками $[n_1 \ n_2 \ n_3]$. В кубическом кристалле имеются плоскости, перпендикулярные этим направлениям, причем они имеют разные межплоскостные расстояния d . В элементарной ячейке может быть больше одного атома, как, например, в кристалле NaCl, ячейка которого содержит два различных атома, тогда координата a -го атома будет даваться

$$\mathbf{r}_a = \mathbf{r}_n + \mathbf{r}_i = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 + \mathbf{r}_i,$$

где $\mathbf{r}_n$ — координата ячейки; $\mathbf{r}_i$ — координата атома относительно ячейки.

Пример двумерной структуры с двумя атомами в элементарной ячейке приведен на рис. 9.9.

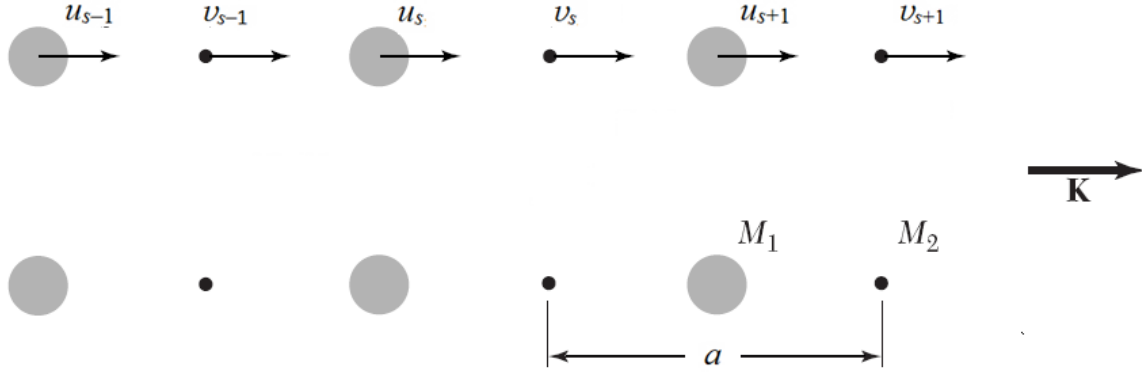


Рис. 9.9. Двухатомная кристаллическая структура с массами атомов M_1 , M_2 , смежные плоскости этой структуры связаны силовой константой γ . Смещения атомов M_1 обозначены u_{s-1} , u_s , u_{s+1} , ..., а атомов M_2 — u_{s-1} , u_s , u_{s+1} ... Период повторяемости в направлении волнового вектора $\mathbf{K}$ равен a . Атомы показаны в их несмещенных (равновесных) положениях. Координаты атомов $(x_i/a, y_i/a)$ в ячейке — $(0, 0)$ и $(1/2, 1/2)$

9.5. Два атома в ячейке. Оптическая ветвь колебаний

Рассмотрим кубический кристалл, в котором атомы массой M_1 образуют одну систему плоскостей, а атомы с массой M_2 — другую систему плоскостей, атомы которой лежат между плоскостями первой системы (см. рис. 9.9). Необязательно, чтобы массы были разными, но существенно, чтобы эти два атома были неэквивалентны либо по массам, либо по силовым постоянным.

Обозначим через a период решетки в направлении нормали к ее плоскостям (направление $\mathbf{K}$ на рис. 9.9). Рассматриваем волны, распространяющиеся в направлениях, для которых каждая перпендикулярная ему отдельная плоскость содержит только один тип ионов; такими направлениями, например, являются направление $[111]$ в структуре NaCl и направление $[100]$ в структуре CsCl.

Аналогично равенствам (9.23, 9.24) запишем уравнения движения в предположении, что каждая плоскость взаимодействует только с ближайшими соседними плоскостями и что силовые постоянные γ одинаковы для всех пар плоскостей, являющихся ближайшими соседями. Тогда получим

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \gamma (v_s + v_{s-1} - 2u_s), \quad M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = \gamma (u_{s+1} + u_s - 2v_s). \quad (9.66)$$

Решения этих уравнений опять будем искать в форме бегущих волн с различными амплитудами u и v для чередующихся плоскостей:

$$u_s = u e^{i s K a} e^{-i \omega t}, \quad v_s = v e^{i s K a} e^{-i \omega t}. \quad (9.67)$$

Подставляя равенства (9.67) в формулу (9.66), получим

$$\begin{aligned} -M_1 \omega^2 u &= \gamma v (1 + e^{-i K a}) - 2\gamma u, \\ -M_2 \omega^2 v &= \gamma u (1 + e^{i K a}) - 2\gamma v \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}(2\gamma - M_1\omega^2)u - \gamma(1 + e^{-iKa})v &= 0, \\ \gamma(1 + e^{iKa})u - (2\gamma - M_2\omega^2)v &= 0.\end{aligned}\quad (9.68)$$

Условием разрешимости этой линейной однородной системы уравнений для двух неизвестных амплитуд u и v является равенство детерминанта нулю

$$M_1M_2\omega^4 - 2\gamma\omega^2(M_1 + M_2) + 2\gamma^2(1 - \cos Ka) = 0. \quad (9.69)$$

Два корня этого уравнения дают две ветви разрешенных частот для каждого значения волнового вектора K (две ветви дисперсионного соотношения):

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{\gamma}{\mu} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \frac{Ka}{2}} \right], \quad (9.70)$$

где $\mu = M_1M_2/(M_1 + M_2)$ – приведенная масса атомов.

Рассмотрим предельные случаи, когда $Ka \ll 1$ и $Ka = \pm\pi/2$ у границ зоны. В первом случае (для малых значений Ka) из равенства (9.70) получаем

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{\gamma}{\mu} \left[1 \pm \left(1 - \frac{M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \frac{K^2 a^2}{2} \right) \right]. \quad (9.71)$$

В результате будем иметь

$$\omega_1^2 = \frac{2\gamma}{\mu} = 2\gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) - \text{оптическая ветвь}, \quad (9.72)$$

$$\omega_2^2 = \frac{\gamma}{2(M_1 + M_2)} K^2 a^2 - \text{акустическая ветвь}. \quad (9.73)$$

Область значений K в первой зоне Бриллюэна описывается неравенством $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$, где a – период решетки; второй случай отвечает границам первой зоны, где значения K максимальны, т. е. $K_{\max} = \pm\pi/a$, тогда имеем корни

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{\gamma}{\mu} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2}} \right] = \frac{\gamma}{M_1M_2} [M_1 + M_2 \pm (M_1 - M_2)],$$

т. е.

$$\omega_1^2 = \frac{2\gamma}{M_2}, \quad \omega_2^2 = \frac{2\gamma}{M_1}. \quad (9.74)$$

Дисперсионные кривые (9.70) изображены на рис. 9.10.

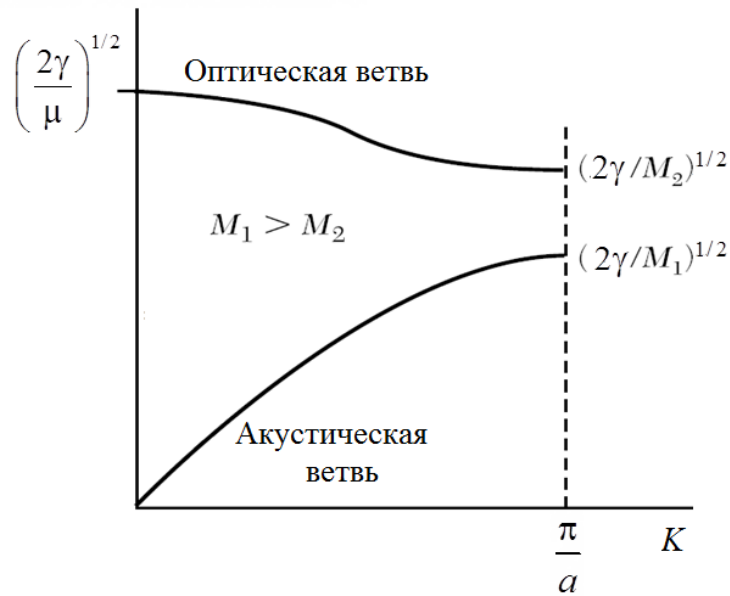


Рис. 9.10. Оптические и акустические фоновые ветви дисперсионного закона (9.70) для двухатомной линейной решетки. Показаны предельные значения частот при $K = 0$ и $K = K_{\max} = \pi/a$, где a – постоянная решетки

Колебания частиц в поперечной акустической (ТА – transverse acoustical) и поперечной оптической (ТО – transverse optical) ветвях показаны на рис. 9.11.



Рис. 9.11 Поперечные оптические и поперечные акустические волны одинаковой длины волны в двухатомной линейной решетке, иллюстрирующие колебания частиц двух видов (оптическая и акустическая моды)

Для оптической ветви при $K = 0$ из уравнений для амплитуд (9.68) с учетом формулы (9.72) нетрудно найти

$$\frac{v}{u} = -\frac{M_1}{M_2}, \quad (9.75)$$

откуда следует, что атомы при оптических колебаниях движутся навстречу друг другу, причем так, что центр их масс в ячейке остается фиксированным. Если ионы заряжены противоположно, то движение такого типа можно возбудить электрическим полем световой волны, по этой причине верхняя ветвь кривой на рис. 9.10 и была названа оптической. Частоты при $K = 0$ для продольных (LO) и поперечных (TO) волн оптической моды обозначаются как ω_L и ω_T .

Пример экспериментальных дисперсионных кривых, полученных из неупругого рассеяния нейтронов [41], приведен на рис. 9.12.

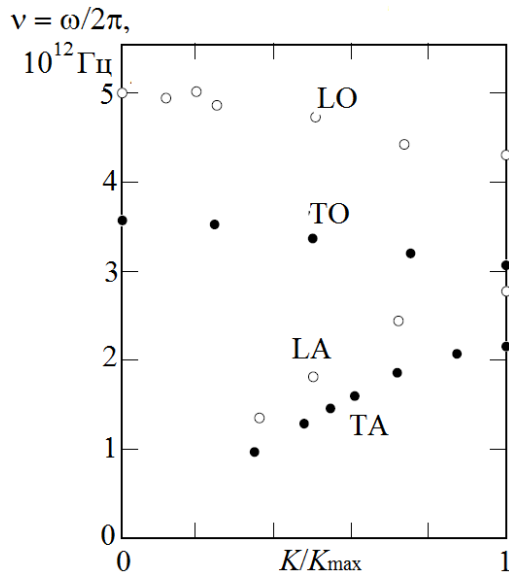


Рис. 9.12. Экспериментальные точки, определяющие дисперсионные кривые для фононов в направлении [111] в кристалле KBr при 90 К. Экстраполяции до $K = 0$ частот ветвей LO и TO называются ω_L и ω_T

Если кристалл поглощает фотон с образованием одного фонона, то условие сохранения волнового вектора приводит к равенству $k_{\text{фотон}} = K_{\text{фонон}}$. Значения волновых векторов фотонов на соответствующих частотах ($\nu \sim 10^{13}$ Гц, $\hbar\omega \approx 4 \cdot 10^{-2}$ эВ, инфракрасная область) имеют порядок 10^3 см^{-1} , а значения волновых векторов фононов доходят до 10^8 см^{-1} . Таким образом, фононы, образованные фотонами в прямых процессах, имеют малые волновые векторы.

Заметим, что из рис. 9.10 вытекает отсутствие решений для частот, заключенных в интервале между $\omega_2 = \sqrt{2\gamma/M_1}$ и $\omega_1 = \sqrt{2\gamma/M_2}$. Этот факт является характерной особенностью распространения упругих волн в многоатомной решетке. В этом случае имеется запрещенная область частот, расположенная у границы первой зоны Бриллюэна при $K = K_{\text{max}} = \pi/a$. В этой области не существует решений для вещественных значений K , и волновой вектор является комплексной величиной, так что любая волна с частотой, попадающей в запрещенную область, сильно поглощается.

Глава 10. Момент количества движения (угловой момент) в квантовой механике

В классической механике *моментом количества движения*, или *моментом импульса частицы*, называется вектор

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}], \quad (10.1)$$

составляющие которого по осям равны

$$L_x = y p_z - z p_y, \quad L_y = z p_x - x p_z, \quad L_z = x p_y - y p_x. \quad (10.2)$$

Возникает вопрос, как построить соответствующие операторы в квантовой механике. Можно, например, исходить из приведенных выражений, заменив соответствующие импульсы операторами, как в табл. 4.1. С другой стороны, можно взять за основу перестановочные соотношения (5.72, 5.74), которые мы получили из общих свойств генераторов поворота в трехмерном пространстве:

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = i\hbar \hat{L}_3, \quad [\hat{L}_3, \hat{L}_1] = i\hbar \hat{L}_2, \quad [\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar \hat{L}_1. \quad (10.3)$$

Здесь индексы 1, 2, 3 нумеруют соответственно оси x, y, z .

Оказывается, что во втором случае результаты получаются более общими. Теория, опирающаяся только на перестановочные соотношения, содержит в себе как частный случай квантовый аналог классического $\mathbf{L}$ (в котором компоненты импульса p_x, y, z заменены на операторы). В этом случае операторы $\hat{L}_i$ определяют так называемый *оператор орбитального момента частицы* $\hat{\mathbf{L}}$.

Но, кроме того, теория, основанная на перестановочных соотношениях, описывает также собственный (внутренний) момент количества частицы $\hat{\mathbf{S}}$ — так называемый *спин*, для которого классического аналога не существует. Мы будем пользоваться термином *угловой момент*, включающим как *орбитальный момент*, так и *спин*, и обозначать оператор углового момента любой природы через $\hat{\mathbf{J}}$.

10.1. Операторы углового момента

Итак, в общем случае оператором *момента количества движения*, или кратко *углового момента*, называется вектор $\hat{\mathbf{J}}$, проекции которого на декартовы координаты $\hat{J}_i$ ($i = x, y, z$ или 1, 2, 3) являются эрмитовыми операторами, удовлетворяющими перестановочным соотношениям (10.3):

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y. \quad (10.4)$$

Введем оператор квадрата углового момента

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \equiv \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2. \quad (10.5)$$

Он коммутирует со всеми проекциями:

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = 0, \quad i = x, y, z. \quad (10.6)$$

Для доказательства вычислим, например,

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_x] &= \hat{J}_y^2 \hat{J}_x - \hat{J}_x \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \hat{J}_x - \hat{J}_x \hat{J}_z^2 = \hat{J}_y \hat{J}_x \hat{J}_y - i\hbar \hat{J}_y \hat{J}_z - \\ &- \hat{J}_y \hat{J}_x \hat{J}_y - i\hbar \hat{J}_z \hat{J}_y + \hat{J}_z \hat{J}_x \hat{J}_z + i\hbar \hat{J}_z \hat{J}_y - \hat{J}_z \hat{J}_x \hat{J}_z + i\hbar \hat{J}_y \hat{J}_z = 0, \end{aligned} \quad (10.7)$$

Положим $\hat{\mathbf{J}} = \hbar \hat{\mathbf{j}}$, тогда безразмерные моменты $\hat{j}_i$ будут удовлетворять тем же перестановочным соотношениям, но где формально $\hbar = 1$:

$$[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hat{j}_z, \quad [\hat{j}_y, \hat{j}_z] = i\hat{j}_x, \quad [\hat{j}_z, \hat{j}_x] = i\hat{j}_y \quad (10.8)$$

и, кроме того,

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_i] = 0. \quad (10.9)$$

Из равенств (10.8, 10.9) следует, что одновременно определенные значения могут иметь квадрат момента и одна из его проекций. В качестве этой проекции обычно выбирается $\hat{j}_z$. Волновые функции таких состояний являются одновременно собственными функциями операторов $\hat{j}^2$ и $\hat{j}_z$ с собственными значениями λ и m . Таким образом, состояния

$$\Phi_{\lambda m} = |\lambda m\rangle \quad (10.10)$$

удовлетворяют уравнениям

$$\hat{j}^2 |\lambda m\rangle = \lambda |\lambda m\rangle, \quad \hat{j}_z |\lambda m\rangle = m |\lambda m\rangle. \quad (10.11)$$

Введем два вспомогательных не эрмитовых оператора, эрмитово-сопряженных друг другу:

$$\hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y, \quad \hat{j}_- = \hat{j}_+^\dagger = \hat{j}_x - i\hat{j}_y. \quad (10.12)$$

Тогда, как нетрудно убедиться при помощи уравнений (10.8) и (10.9), для них будут выполняться перестановочные соотношения

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_\pm] = 0 \quad \text{и} \quad [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = \hat{j}_z, \quad [\hat{j}_z, \hat{j}_+] = \hat{j}_+, \quad [\hat{j}_-, \hat{j}_z] = \hat{j}_-. \quad (10.13)$$

Кроме того, имеют место равенства

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z, \quad \hat{j}^2 = \hat{j}_+ \hat{j}_- + \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z. \quad (10.14)$$

Обратим внимание, что последние два перестановочных соотношения имеют точно такой же вид, как у числа частиц (фононов) и операторов рождения и уничтожения в задаче об осцилляторе. Напомним их:

$$[\hat{N}, a^\dagger] = a^\dagger, \quad [a, \hat{N}] = a.$$

Точно так же, как операторы рождения a^+ и уничтожения a увеличивают или уменьшают число частиц N на единицу, операторы $\hat{j}_{\pm}$ увеличивают или уменьшают проекцию момента m на единицу. Отличие лишь в том, что проекция m ограничена по величине и может принимать разные знаки, число же частиц N всегда положительно и может расти неограниченно. В этом мы убедимся ниже.

Заметим, что момент импульса подобно импульсу аддитивен, т. е. для системы N частиц суммарный момент равен

$$\hat{\mathbf{j}}_{\text{sum}} = \sum_{k=1}^N \hat{\mathbf{j}}_k.$$

10.2. Собственные значения и матричные элементы операторов углового момента

Напомним равенства (10.11):

$$\hat{\mathbf{j}}^2 |\lambda m\rangle = \lambda |\lambda m\rangle, \quad \hat{j}_z |\lambda m\rangle = m |\lambda m\rangle.$$

Поскольку оператор

$$\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 \quad (10.15)$$

есть оператор положительной величины, то при данном λ величина m^2 имеет верхнюю границу, не превосходящую λ . Обозначим верхнюю границу m через j . Но поскольку оба направления оси z физически эквивалентны, то для каждого возможного значения m существует и значение $-m$. Следовательно, нижняя граница m равна $-j$, так что

$$j \leq m \leq j. \quad (10.16)$$

А теперь выясним, как действуют операторы $\hat{j}_+$, $\hat{j}_-$. Рассмотрим состояние $\hat{j}_+ |\lambda m\rangle$ и подействуем на него оператором $\hat{j}_z$. Из перестановочного соотношения

$$\hat{j}_z \hat{j}_+ - \hat{j}_+ \hat{j}_z = \hat{j}_+$$

следует

$$\hat{j}_z \hat{j}_+ = \hat{j}_+ (\hat{j}_z + 1), \quad (10.17)$$

так что

$$\hat{j}_z \hat{j}_+ |\lambda m\rangle = \hat{j}_+ (\hat{j}_z + 1) |\lambda m\rangle = (m+1) \hat{j}_+ |\lambda m\rangle. \quad (10.18)$$

Отсюда вытекает, что

$$\hat{j}_+ |\lambda m\rangle = C_m |\lambda m+1\rangle. \quad (10.19)$$

Следовательно, $\hat{j}_+$ – повышающий оператор, увеличивающий m на единицу. От минимального значения $m = -j$ до максимального $m = j$ можно добраться за $2j$ шагов *единичной длины*. Следовательно, $2j$ – *целое число*!

Из равенства (10.19) видим

$$C_m = \langle \lambda m + 1 | \hat{j}_+ | \lambda m \rangle, \quad (10.20)$$

т. е. C_m – матричный элемент оператора $\hat{j}_+$ в m -представлении. Он должен обратиться в нуль при $m = j$, чтобы предотвратить дальнейший рост m .

Аналогично, используя последнее соотношение из (10.3), запишем

$$\hat{j}_- \hat{j}_z - \hat{j}_z \hat{j}_- = \hat{j}_- \quad \text{или} \quad \hat{j}_z \hat{j}_- = \hat{j}_- \hat{j}_z - \hat{j}_- = \hat{j}_- (\hat{j}_z - 1), \quad (10.21)$$

далее можно получить

$$\hat{j}_- | \lambda m \rangle = C'_m | \lambda m - 1 \rangle \quad (10.22)$$

и

$$C'_m = \langle \lambda m - 1 | \hat{j}_- | \lambda m \rangle. \quad (10.23)$$

Из взаимной сопряженности операторов $\hat{j}_+$, $\hat{j}_-$ следует

$$C'_m = \langle \lambda m - 1 | \hat{j}_- | \lambda m \rangle = \langle \lambda m | \hat{j}_+ | \lambda m - 1 \rangle^* = C_{m-1}^*. \quad (10.24)$$

Далее, используя первое равенство (10.14)

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_- \hat{j}_+ + j_z^2 + j_z, \quad (10.25)$$

найдем собственные значения λ оператора $\hat{\mathbf{j}}^2$. Вычислив сначала

$$\hat{j}_- \hat{j}_+ | \lambda m \rangle = C'_{m+1} C_m | \lambda m \rangle = |C_m|^2 | \lambda m \rangle, \quad (10.26)$$

где мы учли соотношения (10.19), (10.22) и (10.24), получаем

$$\hat{\mathbf{j}}^2 | \lambda m \rangle = (|C_m|^2 + m^2 + m) | \lambda m \rangle = \lambda | \lambda m \rangle. \quad (10.27)$$

Откуда находим

$$|C_m| = \sqrt{\lambda - m(m+1)}. \quad (10.28)$$

С другой стороны, как мы отмечали, при $m = j$, $C_m = 0$, т. е.

$$\lambda = j(j+1) \quad (10.29)$$

и

$$|C_m| = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}. \quad (10.30)$$

Это соотношение определяет абсолютную величину C_m , фаза же является неопределенной. Поскольку она не влияет ни на какие физические результаты, мы положим ее равной нулю, т. е. будем считать эти матричные элементы вещественными (см. уравнение (10.24)):

$$C'_{m+1} = C_m = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \quad (10.31)$$

и

$$C'_m = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}. \quad (10.32)$$

В результате вместе с выводом о том, что $2j$ – *целое неотрицательное число* (т. е. j может принимать как целые, так и полуцелые значения), заключаем, что собственные значения квадрата момента $\mathbf{J}^2$ и его проекции J_z равны

$$\text{с. зн. } \mathbf{J}^2 = \hbar^2 j(j+1); \quad j = 0, 1, 2, \dots \text{ или } j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \quad (10.33)$$

$$\text{с. зн. } J_z = \hbar m; \quad \text{при заданном } j \quad m = -j, -j+1, \dots, j. \quad (10.34)$$

Мы теперь можем определить и отличные от нуля матричные элементы проекций j_x и j_y , употребляя вместо λ число j , как это обычно принято.

Из определения (10.12)

$$\hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y, \quad \hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y$$

имеем

$$\hat{j}_x = \frac{1}{2}(\hat{j}_+ + \hat{j}_-), \quad \hat{j}_y = \frac{1}{2i}(\hat{j}_+ - \hat{j}_-), \quad (10.35)$$

так что

$$\begin{aligned} \hat{j}_x |jm\rangle &= \frac{1}{2}(C_m |jm+1\rangle + C'_m |jm-1\rangle), \\ \hat{j}_y |jm\rangle &= \frac{i}{2}(C'_m |jm-1\rangle - C_m |jm+1\rangle) \end{aligned} \quad (10.36)$$

и

$$\langle jm \pm 1 | \hat{j}_x | jm \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}, \quad (10.37)$$

$$\langle jm \pm 1 | \hat{j}_y | jm \rangle = \mp \frac{i}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}. \quad (10.38)$$

Матрица $\hat{j}_z$ в выбранном представлении является диагональной:

$$\langle jm' | \hat{j}_z | jm \rangle = m \delta_{mm'}. \quad (10.39)$$

Таким образом, мы полностью определили матрицы всех проекций оператора углового момента в представлении $\phi_{\lambda m} = |\lambda m\rangle$, где матрицы $\hat{\mathbf{j}}^2$ и $\hat{j}_z$ диагональны.

10.3. Орбитальный момент количества движения

Оператором орбитального момента является оператор, соответствующий классическому моменту импульса $\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$. В координатном представлении он имеет вид

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x. \quad (10.40)$$

Рассмотрим, в частности, оператор

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (10.41)$$

Он зависит только от координат x и y в плоскости (x, y) , перпендикулярной оси z . Введем в этой плоскости (x, y) полярные координаты ρ и φ :

$$x = \rho \cos \varphi, \quad y = \rho \sin \varphi, \quad (10.42)$$

где ρ – полярный радиус (расстояние от начала координат до точки с координатами x и y); φ – азимутальный угол, отсчитываемый от оси x в направлении против часовой стрелки. Обратное преобразование имеет вид

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x} \quad (10.43)$$

или

$$\sin \varphi = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}, \quad \cos \varphi = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}. \quad (10.44)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \sin \varphi &= \cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{xy}{\left(\sqrt{x^2 + y^2}\right)^3} \quad \text{и} \quad \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{y}{\rho^2} = \frac{\sin \varphi}{\rho}, \\ \frac{\partial}{\partial y} \cos \varphi &= -\sin \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} = -\frac{xy}{\left(\sqrt{x^2 + y^2}\right)^3} \quad \text{и} \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{x}{\rho^2} = \frac{\cos \varphi}{\rho}. \end{aligned} \quad (10.45)$$

В результате

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \left(x \frac{\partial \varphi}{\partial y} - y \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial \varphi} = -i\hbar \frac{x^2 + y^2}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (10.46)$$

т. е. оператор углового момента связан с угловой координатой точно так же, как импульс с обычной координатой. В классической физике точно так же. Момент импульса связан с угловой скоростью как $\mathbf{L} = \mathfrak{I} \boldsymbol{\omega}$, где $\mathfrak{I}$ – момент инерции. Поэтому, как говорят, L_z есть обобщенный импульс, канонически сопряженный угловой координате φ .

Для безразмерного оператора $\hat{l}_z = \hat{L}_z / \hbar$ имеем

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (10.47)$$

Его собственные функции $\psi(\varphi) = \langle \varphi | l_z \rangle$ удовлетворяют уравнению

$$-i \frac{\partial \psi(\varphi)}{\partial \varphi} = l_z \psi(\varphi), \quad (10.48)$$

где переменная φ изменяется в пределах от 0 до 2π . Решениями являются

$$\psi(\varphi) = \langle \varphi | l_z \rangle = A e^{i l_z \varphi}. \quad (10.49)$$

Для выполнения условия однозначности функции (10.49) необходимо, чтобы

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi). \quad (10.50)$$

Это условие удовлетворяется, только если $l_z = m$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, т. е. только при целочисленных значениях m .

Следовательно, из двух вариантов спектра собственных значений (10.33, 10.34) для орбитального момента осуществляется лишь *целочисленный вариант*:

$$\begin{aligned} \text{с. зн. } \hat{\mathbf{L}}^2 &= \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \\ \text{с. зн. } L_z &= \hbar m, \quad m = -l, -l+1, \dots, l. \end{aligned} \quad (10.51)$$

Собственные функции $\psi(\varphi) = \langle \varphi | l_z \rangle$, соответствующие собственным значениям $l_z = m$, нормированные условием

$$\int_0^{2\pi} \psi_n^*(\varphi) \psi_n(\varphi) d\varphi = 1, \quad (10.52)$$

имеют вид

$$\psi_n(\varphi) = \langle \varphi | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \varphi}. \quad (10.53)$$

10.4. Операторы орбитального момента в сферической системе координат

Сферическая система координат r, θ, φ определяется следующим образом (рис. 10.1). Полярная ось направлена по z , от нее отсчитывается полярный угол θ , который изменяется от 0 до π , азимутальный угол φ отсчитывается от оси x и изменяется от 0 до 2π в направлении против часовой стрелки.

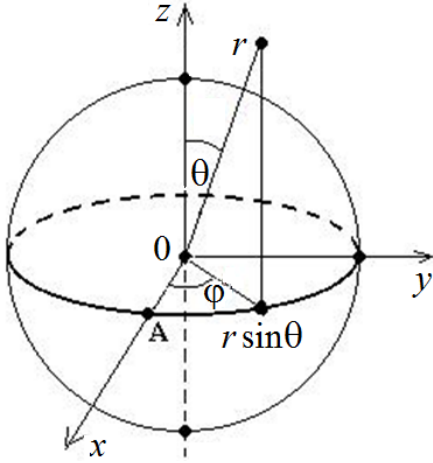


Рис. 10.1. Сферическая система координат. Точка с координатами r, θ, φ имеет декартовы координаты $x = r \sin \theta \cos \varphi, y = r \sin \theta \sin \varphi, z = r \cos \theta$

Переход в сферическую систему координат осуществляется преобразованием

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta. \quad (10.54)$$

Обратное преобразование –

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad \cos \theta = \frac{z}{r}, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}. \quad (10.55)$$

Выпишем все производные, которые могут появиться при переводе проекций момента из декартовой в сферическую систему координат:

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial z} &= \frac{z}{r} = \cos \theta, & \frac{\partial r}{\partial y} &= \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \varphi, & \frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi; \\ \frac{\partial \theta}{\partial z} &= -\frac{\sin \theta}{r}, & \frac{\partial \theta}{\partial y} &= \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r}, & \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r}; \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0, & \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta}, & \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta}. \end{aligned} \quad (10.56)$$

Используя выражения (10.56), получаем

$$\begin{aligned} l_z &= -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i \left\{ \underbrace{r \sin \theta \cos \varphi}_x \underbrace{\left[\frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]}_{\partial/\partial y} - \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{r \sin \theta \sin \varphi}_y \underbrace{\left[\frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]}_{\partial/\partial x} \right\} = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (10.57)$$

Действуя аналогично, для операторов $\hat{l}_{x,y} = \hat{L}_{x,y}/\hbar$ будем иметь

$$\hat{l}_x = i \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (10.58)$$

$$\hat{l}_y = i \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (10.59)$$

Используя равенства (10.58, 10.59), можно построить операторы $\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$:

$$\hat{l}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (10.60)$$

из них проще получить, используя формулу (10.25), выражение для $\hat{l}^2$:

$$\hat{l}^2 = l_- l_+ + l_z^2 + l_z = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (10.61)$$

Собственные функции $\langle \theta, \varphi | l, m \rangle$ операторов $\hat{l}^2$ и $\hat{l}_z$, удовлетворяющие уравнениям

$$\hat{l}^2 \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = l(l+1) \langle \theta, \varphi | l, m \rangle, \quad \hat{l}_z \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = m \langle \theta, \varphi | l, m \rangle, \quad (10.62)$$

называются *сферическими функциями*:

$$\langle \theta, \varphi | l, m \rangle \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (10.63)$$

Ее можно представить в виде

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Theta_{lm}(\theta). \quad (10.64)$$

Функции Θ_{lm} можно построить рекуррентным образом с помощью операторов $l_{\pm}$.

Используя выражение (10.60), имеем

$$\hat{l}_{\pm} Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m\pm 1)\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} - m \operatorname{ctg} \theta \right] \Theta_{lm}(\theta). \quad (10.65)$$

Далее исходим из соотношения $\hat{l}_+ Y_{ll} = 0$, т. е.

$$\frac{\partial \Theta_{ll}}{\partial \theta} - l \operatorname{ctg} \theta \Theta_{ll} = 0. \quad (10.66)$$

Оно эквивалентно

$$\frac{\partial \ln \Theta_{ll}}{\partial \theta} = l \frac{\cos \theta}{\sin \theta}. \quad (10.67)$$

Интегрирование дает

$$\ln \Theta_{ll}(\theta) = l \int \frac{\cos \theta}{\sin \theta} d\theta = l \int \frac{d \sin \theta}{\sin \theta} = l \ln(\sin \theta) = \ln(\sin^l \theta),$$

т. е.

$$\Theta_{ll}(\theta) = A_l \sin^l \theta. \quad (10.68)$$

Константы A_l определяются из нормировки

$$\int_0^\pi |\Theta_{ll}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = A_l^2 \int_0^\pi (\sin \theta)^{2l} \sin \theta d\theta = 1. \quad (10.69)$$

При $l = 0$ имеем

$$A_0^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta = -A_0^2 \int_0^\pi d \cos \theta = 1, \text{ так что } A_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (10.70)$$

Таким образом,

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \quad (10.71)$$

Нормировка на единичную вероятность в телесном угле 4π . В общем случае

$$I_l = \int_0^\pi (\sin \theta)^{2l+1} d\theta = 2 \cdot \frac{(2l)!!}{(2l+1)!!} = \frac{1}{A_l^2}, \quad (10.72)$$

где

$$(2l)!! = 2 \cdot 4 \cdot 6 \cdot \dots \cdot 2l, \quad (2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot 2l+1,$$

в частности, $I_0 = 2$, $I_1 = 4/3$, $I_2 = 16/15$ и так далее, так что

$$A_l = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{(2l+1)!!}{(2l)!!}}. \quad (10.73)$$

В результате для нормированной функции получаем выражение

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{ll}(\theta) e^{il\varphi} = \sqrt{\frac{(2l+1)!!}{(2l)!!}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (\sin \theta)^l e^{il\varphi}. \quad (10.74)$$

Действуя на Y_{ll} оператором L_z , можно получить $Y_{l, l-1}$ и так далее до $Y_{l, -l}$, а следовательно, и Θ_{lm} . Общая формула для $m \geq 0$ имеет вид

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^l \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l}. \quad (10.75)$$

Для случая $m < 0$ нужно Θ_{lm} заменить на $(-1)^m \Theta_{l|m|}$. В частности, при $l = 1$ имеем

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta. \quad (10.76)$$

Состояния с $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5 \dots$ называются s -, p -, d -, f -, g -, h -состояниями и т. д.

При инверсии координат $(x, y, z \rightarrow -x, -y, -z)$ сферические координаты меняются следующим образом: $r, \theta, \varphi \rightarrow r, \pi - \theta, \pi + \varphi$ (см. рис. 10.1). При этом Y_{lm} умножается на $(-1)^l$, так что собственные функции оператора орбитального момента имеют определенную четность. Причем четность состояния с данным l определяется множителем $(-1)^l$.

Действительно, собственные функции оператора орбитального момента имеют структуру полиномов:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \sim \sin^m \theta (\cos^{l-m} \theta + a \cos^{l-m-2} \theta + \dots) e^{im\varphi}. \quad (10.77)$$

При инверсии координат $\theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \pi + \varphi$ имеем

$$\sin(\pi - \theta) = \sin \theta, \quad \cos(\pi - \theta) = -\cos \theta, \quad e^{im(\varphi + \pi)} = (-1)^m e^{im\varphi}. \quad (10.78)$$

Таким образом, из равенств (10.77, 10.78) следует, что

$$PY_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (10.79)$$

Равенство

$$2\pi Y_{l0}(\theta) = \Theta_{l0} \equiv i^l \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos \theta) \quad (10.80)$$

выражает связь сферических функций с полиномами Лежандра $P_l(\cos \theta)$.

10.5. Внутренний момент количества движения – спин

Для собственного момента частицы нет координатного представления, т. е. не существует функции $\psi(\varphi)$. Поэтому отпадают аргументы, в силу которых m должно быть непременно целым. Допустимы как целые, так и полуцелые значения. Будем обозначать операторы квадрата спина и его проекции в единицах $\hbar$ как s^2 и s_z , а собственные значения как $s(s+1)$ и μ . Для частицы со спином число μ должно фигурировать среди индексов представления (как спиновая переменная) наряду с другими переменными. Например, в координатном представлении волновую функцию некоторого произвольного состояния будем записывать в виде $\langle \mathbf{r}, \mu | a \rangle$, $\psi(\mathbf{r}, \mu)$ или $\psi_\mu(\mathbf{r})$. И вся совокупность $\psi_\mu(\mathbf{r})$ изобразится в виде матричного столбца. При этом столбец называется *многокомпонентной волновой функцией*, а отдельные $\psi_\mu(\mathbf{r})$ – ее *компонентами*.

Если достоверно известно, что проекция спина на ось z равна μ_0 , то из всех компонент остается лишь $\psi_{\mu_0}(\mathbf{r})$, а остальные обращаются в нуль.

Рассмотрим простейший и наиболее распространенный случай: $s = 1/2$. Таким спином обладают, в частности, электроны, протоны и нейтроны. Удобно вместо операторов s_x, s_y, s_z ввести пропорциональные им операторы:

$$\sigma_x = 2s_x, \quad \sigma_y = 2s_y, \quad \sigma_z = 2s_z. \quad (10.81)$$

Поскольку собственные значения операторов $s_{x,y,z}$ равны $\pm 1/2$, то собственные значения $\sigma_{x,y,z} = \pm 1$, а собственные значения $\sigma_{x,y,z}^2 = 1$.

Другими словами,

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \quad (10.82)$$

откуда

$$s^2 = \frac{1}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right). \quad (10.83)$$

В сочетании с соотношениями

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i\sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\sigma_y, \quad (10.84)$$

которые следуют из перестановочных соотношений для моментов, это дает

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0, \quad \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y = 0, \quad \sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z = 0 \quad (10.85)$$

и

$$\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z, \quad \sigma_z \sigma_x = i\sigma_y, \quad \sigma_y \sigma_z = i\sigma_x. \quad (10.86)$$

Действительно, из первого соотношения (10.84)

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z,$$

после умножения его слева и справа на σ_x , соответственно, вытекает

$$\sigma_y - \sigma_x \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_x \sigma_z, \quad \sigma_x \sigma_y \sigma_x - \sigma_y = 2i\sigma_z \sigma_x.$$

Складывая, получаем третье уравнение (10.85); аналогично и остальные.

Произведения матриц Паули удобно записать, используя абсолютно антисимметричный символ Леви – Чивиты ε_{ijk} , который определяется так: для четной перестановки индексов i, j, k он равен 1 (для троек (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)), для нечетной перестановки он равен -1 (для троек (3, 2, 1), (1, 3, 2), (2, 1, 3)), а в остальных случаях равен нулю (при любых повторяющихся индексах). Тогда, например, i -ю компоненту векторного произведения можно записать в виде

$$[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_i = \sum_{k,l} \varepsilon_{ikl} a_k b_l \equiv \varepsilon_{ikl} a_k b_l. \quad (10.87)$$

Здесь, как и далее, знак суммирования можно опустить, подразумевая суммирование по повторяющимся индексам. Суммированием по общим индексам можно доказать следующие свойства этого символа:

$$\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{imn} = \delta_{km}\delta_{ln} - \delta_{kn}\delta_{lm}, \quad \varepsilon_{ikl}\varepsilon_{ikm} = 2\delta_{lm}. \quad (10.88)$$

Из равенств (10.87, 10.88) следует

$$\begin{aligned} ([\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \cdot [\mathbf{c} \times \mathbf{d}]) &= [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_i [\mathbf{c} \times \mathbf{d}]_i = \varepsilon_{ikl} a_k b_l \varepsilon_{imn} c_m d_n = \\ &= (\delta_{km}\delta_{ln} - \delta_{kn}\delta_{lm}) a_k b_l c_m d_n = (a_m b_n c_m d_n - a_n b_m c_m d_n) = \\ &= (\mathbf{ac})(\mathbf{bd}) - (\mathbf{bc})(\mathbf{ad}) \equiv \mathbf{a} \cdot (\mathbf{c}(\mathbf{bd}) - \mathbf{d}(\mathbf{bc})) = (\mathbf{a}[\mathbf{b} \times [\mathbf{c} \times \mathbf{d}]]). \end{aligned} \quad (10.89)$$

Выражения (10.82, 10.86) при помощи символа Леви – Чивиты можно объединить:

$$\sigma_i \sigma_k = \delta_{ik} + i\varepsilon_{ikl} \sigma_l, \quad (10.90)$$

тогда

$$(\sigma \mathbf{a})(\sigma \mathbf{b}) = (\mathbf{ab}) + i\sigma[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]. \quad (10.91)$$

Рассмотрим действие операторов $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ на вектор состояния $|s, \mu\rangle$ (символ s для краткости будем далее опускать). Оператор σ_z действует (по определению) следующим образом:

$$\sigma_z |1/2\rangle = |1/2\rangle, \quad \sigma_z |-1/2\rangle = -|-1/2\rangle. \quad (10.92)$$

Правила действия σ_x, σ_y вытекают из общих, полученных ранее формул (10.36):

$$\begin{aligned} \sigma_x |1/2\rangle &= |-1/2\rangle, \quad \sigma_x |-1/2\rangle = |1/2\rangle, \\ \sigma_y |1/2\rangle &= i|-1/2\rangle, \quad \sigma_y |-1/2\rangle = -i|1/2\rangle. \end{aligned} \quad (10.93)$$

Умножая равенства (10.92, 10.93) слева скалярно на $\langle \pm 1/2 |$, получим матричные элементы операторов. В результате для матриц операторов $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ будем иметь

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (10.94)$$

Они называются *матрицами Паули*. Многокомпонентная волновая функция $|s, \mu\rangle$ произвольного состояния сводится к столбцу из двух элементов (представляющих собой амплитуды вероятности c_1 и c_2 найти частицу с проекциями спина по или против оси z), который называется *спинором*:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv c_1 \chi_{\frac{11}{22}} + c_2 \chi_{\frac{1-1}{2-2}} \equiv c_1 \left| \frac{1}{2} \right\rangle + c_2 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (10.95)$$

Здесь $\chi_{\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}} \equiv |\pm 1/2\rangle$ – собственные состояния оператора проекции спина s_z с собственными значениями $\pm 1/2$ или σ_z с собственными значениями ± 1 . Как видим, они представляются как

$$\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} 1 \\ 2 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} -1 \\ 2 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (10.96)$$

Действительно,

$$\sigma_z \begin{vmatrix} 1 \\ 2 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z \begin{vmatrix} -1 \\ 2 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (10.97)$$

т. е.

$$\sigma_z \chi_{\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}} = \pm \chi_{\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}} \quad \text{или} \quad \sigma_z \begin{vmatrix} \pm 1 \\ 2 \end{vmatrix} = \pm \begin{vmatrix} \pm 1 \\ 2 \end{vmatrix}. \quad (10.98)$$

10.6. Уравнение Шредингера для частицы во внешнем электромагнитном поле. Магнитный момент

Рассмотрим движение электрона во внешнем электромагнитном поле, заданном 4-потенциалом $A_\mu = (\Phi, \mathbf{A})$. По принципу соответствия определим гамильтониан (нерелятивистского) электрона (с массой m_e):

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi. \quad (10.99)$$

Действительно, классические уравнения Гамильтона (6.16) в этом случае запишутся как

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{m_e} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \equiv \frac{\mathbf{P}}{m}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = -e \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{2m_e} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2. \end{aligned}$$

Величина $\mathbf{P} = \mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A} = m\dot{\mathbf{r}} = m\mathbf{v}$ есть обычный импульс частицы, она еще называется *кинетическим импульсом* в отличие от канонического (обобщенного) импульса $\mathbf{p}$. Используя известную формулу

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\mathbf{ab})}{\partial \mathbf{r}} &\equiv \text{grad}(\mathbf{ab}) \equiv \nabla(\mathbf{ab}) = \\ &= (\mathbf{b}\nabla)\mathbf{a} + (\mathbf{a}\nabla)\mathbf{b} + \mathbf{b} \times [\nabla \times \mathbf{a}] + \mathbf{a} \times [\nabla \times \mathbf{b}] \equiv \\ &\equiv (\mathbf{b}\nabla)\mathbf{a} + (\mathbf{a}\nabla)\mathbf{b} + \mathbf{b} \times \text{rot } \mathbf{a} + \mathbf{a} \times \text{rot } \mathbf{b}, \end{aligned}$$

получаем

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2m_e} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \equiv -\frac{1}{2m_e} \nabla \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \\
& = -\frac{1}{m_e} \left\{ \left(\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \nabla \right) \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) - \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \text{rot} \left(\frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right\} = \\
& = (\dot{\mathbf{r}} \nabla) \frac{e}{c} \mathbf{A} + \frac{e}{c} \dot{\mathbf{r}} \times [\nabla \times \mathbf{A}] = \frac{e}{c} (\dot{\mathbf{r}} \nabla) \mathbf{A} + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}],
\end{aligned}$$

где

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \equiv \text{rot } \mathbf{A}$$

есть магнитное поле, действующее на частицу. Таким образом, второе уравнение Гамильтона дает

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{d\mathbf{P}}{dt} + \frac{e}{c} \frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{e}{c} (\dot{\mathbf{r}} \nabla) \mathbf{A} - e \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} + e \frac{[\mathbf{v} \times \mathbf{B}]}{c}.$$

Используя выражение для полной производной

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\dot{\mathbf{r}} \nabla) \mathbf{A},$$

имеем

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = m\ddot{\mathbf{v}} = -\frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - e \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} + e \frac{[\mathbf{v} \times \mathbf{B}]}{c} = e\mathbf{E} + e \frac{[\mathbf{v} \times \mathbf{B}]}{c},$$

где $\mathbf{E}$ – электрическое поле, действующее на частицу:

$$\mathbf{E} = -\frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}}.$$

Таким образом, исходя из функции Гамильтона (10.99), мы получили правильное уравнение движения заряженной частицы в электрическом и магнитном полях под действием силы Лоренца:

$$\mathbf{F} = e\mathbf{E} + e \frac{[\mathbf{v} \times \mathbf{B}]}{c}.$$

Чтобы перейти к квантовому описанию, мы должны канонический импульс заменить оператором $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$. Соответственно, оператор

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (10.100)$$

есть оператор кинетического импульса.

Пусть задано постоянное однородное магнитное поле $\mathbf{B}$:

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} \equiv \nabla \times \mathbf{A}, \quad (10.101)$$

векторный потенциал которого выберем в виде

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{B} \times \mathbf{r}], \quad \text{div} \mathbf{A} \equiv \nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (10.102)$$

Эти соотношения легко доказываются, если выбрать, например, ось z вдоль вектора $\mathbf{B}$, тогда $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ и

$$A_x = -B_z y / 2, \quad A_y = B_z x / 2, \quad A_z = 0, \quad (10.103)$$

так что

$$\begin{aligned} [\nabla \times \mathbf{A}]_x &= \nabla_y A_z - \nabla_z A_y = 0, \quad [\nabla \times \mathbf{A}]_y = \nabla_z A_x - \nabla_x A_z = 0, \\ [\nabla \times \mathbf{A}]_z &= \nabla_x A_y - \nabla_y A_x = B_z. \end{aligned} \quad (10.104)$$

Можно также использовать известные соотношения

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{A}_1 \times \mathbf{A}_2 &= (\mathbf{A}_2 \text{grad}) \mathbf{A}_1 - (\mathbf{A}_1 \text{grad}) \mathbf{A}_2 + \mathbf{A}_1 \text{div } \mathbf{A}_2 - \mathbf{A}_2 \text{div } \mathbf{A}_1, \\ \text{div } \mathbf{A}_1 \times \mathbf{A}_2 &= \mathbf{A}_2 \text{rot } \mathbf{A}_1 - \mathbf{A}_1 \text{rot } \mathbf{A}_2. \end{aligned} \quad (10.105)$$

Тогда, учитывая, что квадрат кинетического импульса равен

$$\hat{\mathbf{P}}^2 = \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{c} (\mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \mathbf{A}) + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2, \quad (10.106)$$

а также

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} \mathbf{A} \psi &= \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} \psi - i\hbar (\nabla \mathbf{A}) \psi = \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} \psi, \\ \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} &= \frac{1}{2}([\mathbf{B} \times \mathbf{r}] \hat{\mathbf{p}}) \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{B} [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \hat{\mathbf{L}}, \end{aligned} \quad (10.107)$$

где $\hat{\mathbf{L}}$ – оператор момента импульса частицы, получаем гамильтониан электрона в постоянном магнитном поле и произвольном электрическом поле $\mathbf{E} = -\nabla \Phi$:

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + e\Phi - \frac{e}{2m_e c} \mathbf{B} \hat{\mathbf{L}} + \frac{e^2}{8m_e c^2} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]^2. \quad (10.108)$$

Здесь третье слагаемое описывает взаимодействие U_L орбитального магнитного момента $\mathbf{M}$ электрона с магнитным полем индукции $\mathbf{B}$:

$$\hat{U}_L = -\frac{e}{2m_e c} \mathbf{B} \hat{\mathbf{L}} \equiv -\hat{\mathbf{M}} \mathbf{B}, \quad \hat{\mathbf{M}} = \frac{e}{2m_e c} \hat{\mathbf{L}}. \quad (10.109)$$

Коэффициент пропорциональности g_L между магнитным моментом и моментом импульса называется *гиромагнитным отношением*:

$$g_L = \frac{e}{2m_e c}. \quad (10.110)$$

Взаимодействие U_L имеет классический аналог. В общем случае протяженной заряженной системы, характеризуемой плотностью электрического тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, энергия ее взаимодействия с постоянным магнитным полем ($\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \mathbf{r}/2$) в рамках классической электродинамики имеет вид

$$U_c = -\frac{1}{c} \int d^3r \mathbf{j} \mathbf{A} = -\frac{1}{2c} \int d^3r \mathbf{j} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}] = -\frac{1}{2c} \int d^3r \mathbf{B} [\mathbf{r} \times \mathbf{j}] \equiv -\mathbf{M} \mathbf{B}, \quad (10.111)$$

где $\mathbf{M}$ – магнитный момент системы:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2c} \int d^3r [\mathbf{r} \times \mathbf{j}]. \quad (10.112)$$

Для системы N точечных заряженных частиц плотность тока имеет вид

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_{a=1}^N e_a \mathbf{v}_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a). \quad (10.113)$$

И магнитный момент будет

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2c} \int d^3r [\mathbf{r} \times \mathbf{j}] = \sum_{a=1}^N \frac{e_a}{2m_a c} \mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a. \quad (10.114)$$

Когда все частицы имеют одинаковое отношение заряда к массе, $e_a/m_a = e/m_e$, получаем пропорциональность магнитного и орбитального моментов:

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2m_e c} \mathbf{L}, \quad \mathbf{L} = \sum_{a=1}^N \mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a. \quad (10.115)$$

10.7. Атом во внешнем магнитном поле

Для электрона в атоме электростатическое взаимодействие значительно сильнее его взаимодействия с магнитными полями, поэтому квадратичным по напряженности поля $\mathbf{B}$ слагаемым в гамильтониане можно пренебречь, тогда оператор Гамильтона для электрона будет иметь вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{\mathbf{M}} \mathbf{B}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + e\Phi, \quad \hat{\mathbf{M}} = g_L \hat{\mathbf{L}}. \quad (10.116)$$

Пусть магнитное поле направлено по оси z : $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$. Рассматриваем простую модель атома щелочного металла: один валентный электрон движется в некотором центральном поле, создаваемом кулоновским взаимодействием с ядром и распределенным по объему атома зарядом остальных электронов. Элек-

тростатический потенциал в этом случае будет иметь сферическую симметрию $\Phi = \Phi(|\mathbf{r}|) = \Phi(r)$.

Тогда операторы $\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2, L_z$ образуют полный набор коммутирующих операторов, т. е. имеют общую систему собственных функций ψ_{nlm} :

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_{nlm} &= E_{nlm}\psi_{nlm}, \\ \hat{\mathbf{L}}^2\psi_{nlm} &= \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm}, \\ \hat{L}_z\psi_{nlm} &= \hbar m\psi_{nlm}.\end{aligned}\tag{10.117}$$

Здесь собственные значения энергии E_{nlm} равны

$$E_{nlm} = E_{nl}^0 - m \frac{e\hbar}{2m_e c} B, \quad m = -l, -l+1, \dots, l.\tag{10.118}$$

Здесь E_{nl}^0 – собственные значения гамильтониана $\hat{H}_0$ (в отсутствие магнитного поля при $\mathbf{B} = 0$), имеющего, очевидно, те же собственные функции, что и $\hat{H}$:

$$\hat{H}_0\psi_{nlm} = E_{nl}^0\psi_{nlm}.\tag{10.119}$$

Мы видим, что возникла естественная единица измерения магнитного момента, называемая *магнетоном Бора*:

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c} = \frac{|e|}{2} \lambda_{ce},\tag{10.120}$$

где $|e|$ – абсолютная величина заряда электрона, так что сам заряд электрона $e = -|e| < 0$, заряд же протона $e_p = |e| > 0$. Величина

$$\mu_N = \frac{|e|\hbar}{2m_p c} = \frac{e}{2} \lambda_{cp}\tag{10.121}$$

называется *ядерным магнетоном*.

Ввиду сферической симметрии оператора $\hat{H}_0$ его собственные значения E_{nl}^0 вырождены с кратностью $2l+1$, равной числу возможных значений проекций момента импульса на ось z .

Включение магнитного поля нарушает сферическую симметрию системы и приводит к снятию вырождения по квантовому числу m : уровни энергии расщепляются на $2l+1$ подуровня. Обратим внимание на то, что при целом значении l это нечетное число!

Замечание. Для чисто кулоновского потенциала $\Phi = -e/r$ в атоме водорода имеется добавочное вырождение уровней энергии по l . Оно связано с теоремой Бертрана, которая гласит, что в трехмерном пространстве существуют только два потенциала: $\sim 1/r$ и $\sim r^2$, (т. е. кулоновский и осцилляторный), в которых классические траектории частиц замкнуты. В результате появляются новые интегралы движения (например, сохраняется направление оси эллипса траектории

в кулоновском поле – вектор Рунге – Ленца). Любое отличие потенциала от чисто кулоновского приводит в Солнечной системе, например, к повороту перигелия Меркурия за счет наличия других планет, а также из-за поправок, связанных с общей теорией относительности, а в квантовой механике – к снятию вырождения $2s$ - и $2p$ -уровней в атоме водорода (лэмбовский сдвиг), который объясняется релятивистским квантовым «дрожанием» электрона в атоме.

10.8. Открытие спина электрона

Итак, теория Шредингера предсказывает, что в магнитном поле уровни энергии атома должны расщепляться на нечетное число подуровней, образующих мультиплет. Эксперимент частично подтверждает это предсказание (эффект Зеемана, 1896). Однако картина оказалась более сложной. Было экспериментально показано, что структура мультиплетов зависит от типа атома и может быть различной даже для одного и того же атома.

В частности, наблюдаются как нечетные, так и четные мультиплеты, как если бы l было полуцелым, что явно противоречит теории Шредингера. Более того, обнаруживается тонкая структура уровней даже в отсутствие внешнего магнитного поля. Рассмотрим, например, уровень валентного электрона в щелочном атоме натрия $n = 2$, $l = 1$ ($2p$ -уровень). По теории Шредингера имеем трехкратное вырождение уровня энергии. Эксперимент же показывает, что этот уровень расщеплен на два близких подуровня (причем при $\mathbf{B} = 0$!).

Наиболее ярко противоречие теории и эксперимента проявилось в опытах Штерна и Герлаха (1922) [14, 42]. Суть этих опытов в следующем: если пропускать узкий пучок, скажем, атомов водорода в основном состоянии ($n = 1$, $l = 0$) через область неоднородного магнитного поля, то обнаруживается, что пучок расщепляется на два.

Результаты опытов можно объяснить, предположив, что атом водорода в основном состоянии обладает магнитным моментом. Тогда гамильтониан атома (заряд = 0) в магнитном поле запишется в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_H} - \hat{\mathbf{M}}\mathbf{B}, \quad (10.122)$$

где $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{r})$ – индукция неоднородного магнитного поля. Если ось z направить по полю, то на атом, влетающий в область поля перпендикулярно оси z , начинает действовать сила:

$$\mathbf{F} = M_z \frac{\partial B}{\partial z} \mathbf{e}_z. \quad (10.123)$$

Эксперимент показал, что проекция магнитного момента атома в основном состоянии на заданное направление может принимать только два значения:

$$M_z = \pm \mu_B, \quad (10.124)$$

где μ_B – введенный выше магнетон Бора.

Поскольку в основном состоянии орбитальный момент электрона равен нулю, а масса ядра атома водорода (протона) значительно больше массы электрона, то естественно предположить, что электрон обладает собственным магнитным моментом μ , величина которого равна μ_B . При этом магнитный момент электрона пропорционален его собственному моменту импульса (спину) S :

$$\mu = g_S S, \quad (10.125)$$

где g_S – спиновое гиромагнитное отношение.

Тогда результаты эксперимента интерпретируются так:

$$M_z = \mu_z = \mp \mu_B = g_S S_z, \quad S_z = \pm \frac{\hbar}{2}, \quad g_S = \frac{e}{m_e c} = 2g_L. \quad (10.126)$$

Заметим, что для электрона $e < 0$, так что и $g_S < 0$.

Гипотезу о существовании спина электрона выдвинули Уленбек и Гаудсмит (1925) [43], предложившие модель электрона в виде заряженного шарика, который вращается вокруг своей оси. Хотя такая полуклассическая модель объясняет пропорциональность магнитного и механического моментов, но дает неправильное значение спинового гиромагнитного отношения, равное орбитальному: из эксперимента следует в два раза большее значение.

10.9. Уравнение Паули

Спин в аппарат квантовой механики был введен Паули [44, 45]. Он предложил (постулировал) в 1927 г. для описания электрона уравнение, которое носит его имя:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_p \psi, \quad \hat{H}_p = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi - \hat{\mu} \mathbf{B}.$$

Гамильтониан Паули отличается от шредингеровского добавлением слагаемого, описывающего взаимодействие с магнитным полем спинового магнитного момента электрона, представляемого оператором

$$\hat{\mu} = g_S \hat{S} = -\mu_B \boldsymbol{\sigma}. \quad (10.127)$$

Как мы отмечали, спиновая волновая функция электрона является двухкомпонентной:

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}. \quad (10.128)$$

С другой стороны, оператор, преобразующий волновую функцию при повороте на угол φ относительно заданной оси $\mathbf{n}$, определяется моментом количества движения:

$$R_{\varphi \mathbf{n}} = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{L}} \mathbf{n} \varphi \right), \quad (10.129)$$

так что при повороте вокруг оси z спиновая функция преобразуется как

$$\chi' = e^{\frac{i}{\hbar} S_z \varphi} \chi = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{\sigma_z}{2} \varphi} \chi. \quad (10.130)$$

В частности, при повороте на 2π получим преобразование

$$\chi \rightarrow \chi' = e^{i\pi} \chi = -\chi. \quad (10.131)$$

Следовательно, для *спинора* этот поворот не эквивалентен тождественному преобразованию, как это имеет место для целочисленных моментов. Чтобы получить тождественное преобразование, нужно систему повернуть на 4π !

10.10. Прецессия спина в магнитном поле. Представление Шредингера

Если проекция спина на направление магнитного поля не имеет определенного значения, то состояние частицы в магнитном поле будет нестационарным. В однородном поле оператор взаимодействия магнитного момента частицы с полем не содержит координат, поэтому мы можем представить волновую функцию в виде произведения спиновой и координатной частей. Для нейтральной частицы координатная часть волновой функции не зависит от магнитного поля, и она описывает просто свободное движение частицы.

Интересующие нас эффекты связаны со спиновой частью волновой функции, и поэтому мы будем рассматривать только ее.

Спиновая часть гамильтониана H_S для частицы со спином $s = 1/2$ есть

$$\hat{H}_S = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \mathbf{B}, \quad (10.132)$$

где

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_B g \hat{\mathbf{s}} = g \mu_B \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} = \gamma \mu_B \boldsymbol{\sigma} = \mu \boldsymbol{\sigma}, \quad (10.133)$$

величина γ представляет собой магнитный момент μ частицы, выраженный в единицах магнетонов Бора μ_B ; вектор $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ образован матрицами Паули σ_i ; $\mathbf{s} = \mathbf{S}/\hbar = \boldsymbol{\sigma}/2$ – безразмерный оператор спина частицы. Заметим, что при таком определении связи магнитного момента и спина g -фактор становится безразмерным. Поскольку магнитный момент μ для электронов близок к магнетону Бора с высокой точностью, то $\mu = \mu_B = e\hbar/2m_e c$ ($e = -|e|$) и $g \approx 2$. Для нуклонов же их магнитные моменты μ существенно отличаются от ядерного магнетона μ_N , они содержат еще и так называемую *аномальную часть* μ' (*аномальный магнитный момент*):

$$\mu' = \mu - \mu_N \equiv \mu - \frac{e\hbar}{2m_p c}. \quad (10.134)$$

В частности, у нейтрона магнитный момент целиком аномален в силу его нейтральности.

Таким образом, g -факторы нуклонов существенно отличны от 2, что свидетельствует о более сложной структуре нуклонов по сравнению с электроном, g -фактор которого очень близок к двум.

Обозначим через $\mathbf{n}$ единичный вектор вдоль направления поля $\mathbf{B}$. Его декартовы составляющие n_x, n_y, n_z в сферической системе координат выражаются через углы θ, φ :

$$n_x = \sin \theta \cos \varphi, \quad n_y = \sin \theta \sin \varphi, \quad n_z = \cos \theta. \quad (10.135)$$

Тогда

$$\hat{H}_S = -\mu B(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}). \quad (10.136)$$

Соответственно, оператор эволюции (см. равенство (5.20)) спиновой части есть

$$S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = e^{-\frac{i}{\hbar} \mu B(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) t}. \quad (10.137)$$

Разлагая экспоненту в ряд и пользуясь свойствами матриц Паули, в силу которых $(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})^2 = 1$, можно привести S к виду

$$S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = e^{\frac{i}{\hbar} \mu B(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) t} = \cos \frac{\mu B}{\hbar} t + i(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) \sin \frac{\mu B}{\hbar} t. \quad (10.138)$$

Допустим, что в начальный момент спин частицы имел проекцию $+1/2$ на ось z . Тогда амплитуда вероятности иметь проекцию $-1/2$ на ось z (амплитуда переворота спина) в момент t равна

$$\begin{aligned} A_{(1/2 \rightarrow -1/2)} &\equiv A_{-1/2, 1/2} = \langle -1/2 | S(t) | 1/2 \rangle \equiv \langle - | S(t) | + \rangle = \\ &= \langle - | \left[\cos \frac{\mu B}{\hbar} t + i(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) \sin \frac{\mu B}{\hbar} t \right] | + \rangle = \langle - | (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) | + \rangle i \sin \frac{\mu B}{\hbar} t = \\ &= (\langle - | \sigma_x | + \rangle \sin \theta \cos \varphi + \langle - | \sigma_y | + \rangle \sin \theta \sin \varphi) i \sin \frac{\mu B}{\hbar} t = \\ &= \sin \theta (\cos \varphi + i \sin \varphi) i \sin \frac{\mu B}{\hbar} t = i e^{i\varphi} \sin \theta \sin \frac{\mu B}{\hbar} t. \end{aligned} \quad (10.139)$$

Величину $\sin \theta$ можно выразить через поперечную составляющую $B_{\perp}$ магнитного поля $\mathbf{B}$:

$$\sin \theta = \frac{B_{\perp}}{B} = \frac{B_{\perp}}{\sqrt{B_{\perp}^2 + B_z^2}}, \quad (10.140)$$

где

$$B_{\perp} = \sqrt{B_x^2 + B_y^2}. \quad (10.141)$$

Так что для вероятности переворота спина $W_{-1/2, 1/2}$, получаем

$$W_{-1/2, 1/2} = \frac{B_{\perp}^2}{B_{\perp}^2 + B_z^2} \sin^2 \frac{\mu B}{\hbar} t = \frac{B_{\perp}^2}{B_{\perp}^2 + B_z^2} \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2\mu B}{\hbar} t \right). \quad (10.142)$$

10.11. Прецессия спина в магнитном поле. Представление Гейзенберга

Чтобы более наглядно представить картину, рассмотрим задачу в представлении Гейзенберга, в котором во времени изменяются операторы, а волновые функции остаются неизменными. В этом случае операторное уравнение движения спина будет иметь вид (см. уравнение (5.36))

$$\dot{\mathbf{s}} = \frac{i}{\hbar} (H\mathbf{s} - \mathbf{s}H) = \frac{i}{2\hbar} (H\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}H) = -\frac{i\mu}{2\hbar} \{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B})\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B})\} \quad (10.143)$$

или в компонентах (см. соотношение (10.84))

$$\dot{s}_i = \frac{i\mu}{2\hbar} B_k (\sigma_k \sigma_i - \sigma_i \sigma_k) = -\frac{\mu}{\hbar} \varepsilon_{ikl} B_k \sigma_l. \quad (10.144)$$

Здесь подразумевается суммирование по повторяющимся индексам k и l , а перестановочные соотношения (10.84) переписаны в тождественной форме

$$\sigma_k \sigma_i - \sigma_i \sigma_k = -[\sigma_i, \sigma_k] = -2i\varepsilon_{ikl} \sigma_l. \quad (10.145)$$

В результате из равенства (10.144) с использованием соотношения (10.87) имеем

$$\dot{\mathbf{s}} = -\frac{2\mu}{\hbar} [\mathbf{s} \times \mathbf{B}]. \quad (10.146)$$

Это выражение можно тождественно переписать в виде

$$\hbar \dot{\mathbf{s}} = \dot{\mathbf{S}} = -\mu [\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{B}], \quad (10.147)$$

который совпадает с классическим уравнением движения механического волчка с моментом импульса $\mathbf{S}$ под действием момента силы, действующей на магнитный момент в магнитном поле.

Усреднив равенство (10.146) по неменяющемуся состоянию, получим уравнение для вектора среднего спина, или поляризации $\mathbf{P} = \langle \mathbf{s} \rangle / s = 2\langle \mathbf{s} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$:

$$\dot{\mathbf{P}} = -\frac{2\mu}{\hbar} [\mathbf{P} \times \mathbf{B}]. \quad (10.148)$$

Это уравнение описывает прецессию вектора $\mathbf{P}$ (спина) относительно направления поля $\mathbf{B}$ с частотой $\omega_0 = -2\mu B/\hbar$. Действительно, направив ось z по магнитному полю $\mathbf{B}$, т. е. полагая $B_z = B$, $B_x = B_y = 0$, получаем систему уравнений

$$\dot{P}_x = +\frac{2\mu}{\hbar} B_z P_y, \quad \dot{P}_y = -\frac{2\mu}{\hbar} B_z P_x, \quad \dot{P}_z = 0. \quad (10.149)$$

Как нетрудно видеть, решение этой системы (при $P_x(0) = 0$, $P_y(0) = P_{0\perp}$) –

$$P_z = \text{const} = P_{0\parallel}, \quad P_x = P_{0\perp} \sin \omega_0 t, \quad P_y = P_{0\perp} \cos \omega_0 t, \quad (10.150)$$

где величина

$$\omega_0 = \frac{2\mu B}{\hbar} \quad (10.151)$$

называется *ларморовской частотой прецессии спина*.

Таким образом, вектор $\mathbf{P}_\perp$ с компонентами (P_x, P_y) вращается в плоскости (x, y) против часовой стрелки (если смотреть вдоль вектора $\mathbf{B}$) с угловой скоростью ω_0 , т. е. спин прецессирует относительно направления поля $\mathbf{B}$ (рис. 10.2) против часовой стрелки.

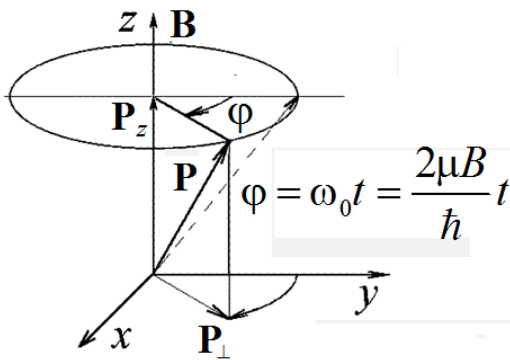


Рис. 10.2. Прецессия спина вокруг магнитного поля $\mathbf{B}$ с угловой частотой ω_0 против часовой стрелки, т. е. вектор $\boldsymbol{\omega}$ направлен против $\mathbf{B}$

Таким образом, частоту прецессии можно записать в векторном виде как

$$\boldsymbol{\omega}_0 = -\frac{2\mu\mathbf{B}}{\hbar}. \quad (10.152)$$

Если частица заряжена, то в том же поле на нее действует сила Лоренца

$$\mathbf{F} = \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]. \quad (10.153)$$

Классическое уравнение движения этой частицы имеет вид

$$\dot{\mathbf{v}} = \frac{e}{mc} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \equiv \frac{2\mu_D}{\hbar} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}], \quad (10.154)$$

где мы обозначили через $\mu_D = e\hbar / 2mc$ нормальный (или дираковский) магнитный момент частицы с массой m и зарядом e (для электрона это магнетон Бора, для протона – ядерный магнетон).

Таким образом, точно так же, как и спин, вектор скорости $\mathbf{v}$ прецессирует вокруг направления $\mathbf{B}$ с угловой скоростью

$$\boldsymbol{\omega} = -\frac{e\mathbf{B}}{mc} = -\frac{2\mu_D\mathbf{B}}{\hbar}. \quad (10.155)$$

Когда $\mu' = 0$, эта угловая скорость совпадает со скоростью $2\mu_D B / \hbar$ и, следовательно, вектор поляризации сохраняет постоянный угол с направлением движения.

Наличие аномального магнитного момента приводит к прецессии спина относительно направления скорости частицы. Это используется для прямого измерения аномальных магнитных моментов частиц, так называемые $(g - 2)$ -эксперименты.

Глава 11. Движение частицы в центральном поле

Под движением частицы в центральном поле понимается движение частицы в потенциале *неподвижного* силового центра. Однако источником силового поля обычно является другая частица (например, ядро для электрона в атоме) или даже макроскопическое тело (например, кристалл, в котором движутся электроны или нейтроны), т. е. рассматривается задача о движении двух взаимодействующих тел, поэтому уточним понятие неподвижного силового центра.

Гамильтониан системы двух взаимодействующих тел (частиц) имеет вид

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|),$$

где m_1 , $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{r}_1$ и m_2 , $\mathbf{p}_2$, $\mathbf{r}_2$ – массы, импульсы и координаты первой и второй частиц соответственно. Зависимость потенциала взаимодействия $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ этих частиц только от расстояния между ними означает центральность сил. Напомним, что *системой центра масс* (с. ц. м.) называется система отсчета, в которой центр масс покоится, т. е. полный импульс $\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = 0$ и $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}$. В классической механике координаты центра масс определяются из условия, что центр масс системы движется равномерно и прямолинейно (закон сохранения полного импульса системы):

$$\mathbf{P} = M\dot{\mathbf{R}} = m_1\dot{\mathbf{r}}_1 + m_2\dot{\mathbf{r}}_2 = \text{const},$$

где $M = m_1 + m_2$, откуда следует

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}.$$

Таким образом, в системе центра масс ($\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}$) гамильтониан примет вид

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) + U(|\mathbf{r}|) \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r),$$

где $r = |\mathbf{r}| \equiv |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ – расстояние между частицами; m – приведенная масса,

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

В результате задача о движении двух взаимодействующих частиц сводится к задаче о движении одной частицы с приведенной массой в поле неподвижного силового центра. Когда масса одной из частиц существенно превышает массу другой, приведенная масса практически совпадает с массой легкой частицы (как, например, для электрона в атоме водорода или для движения частицы в кристалле). Когда же массы одинаковы (как, например, в случае дейтона – системы, состоящей из протона и нейтрона, связанными ядерными силами), приведенная масса равна половине массы частицы (подробнее см. раздел 12.5).

11.1. Уравнение Шредингера в сферических координатах

Рассмотрим движение частицы в стационарном поле, в котором ее потенциальная энергия зависит от координат следующим образом:

$$U = U(r), \quad r = |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (11.1)$$

т. е. зависит только от расстояния до силового центра, расположенного в начале координат. Такое поле называется *центрально-симметричным*, или просто *центральным*. В этом случае гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r) \quad (11.2)$$

инвариантен относительно поворотов в пространстве и поэтому должен коммутировать с оператором орбитального момента:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = 0. \quad (11.3)$$

Это можно непосредственно увидеть, если записать в сферических координатах оператор квадрата импульса

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2}. \quad (11.4)$$

Давайте сделаем это в самом общем виде. Используя соотношение (10.89) в виде

$$\begin{aligned} ([\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \cdot [\mathbf{b} \times \mathbf{a}]) &= (\mathbf{ab})(\mathbf{ba}) - (\mathbf{aa})(\mathbf{bb}) \equiv \\ &\equiv \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b}(\mathbf{ba}) - \mathbf{a}(\mathbf{bb})) = (\mathbf{a}[\mathbf{b} \times [\mathbf{b} \times \mathbf{a}]]), \end{aligned} \quad (11.5)$$

имеем

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})^2 = -(\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) = -\hat{\mathbf{p}} \cdot (\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})) = -\hat{\mathbf{p}} [\mathbf{r}(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) - r^2\hat{\mathbf{p}}]. \quad (11.6)$$

Из фундаментального коммутационного соотношения

$$[\hat{p}_i, x_k] = -i\hbar\delta_{ik} \quad (11.7)$$

следуют коммутаторы

$$[\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}] = \hat{\mathbf{p}}\mathbf{r} - \mathbf{r}\hat{\mathbf{p}} = p_i x_i - x_i p_i = -3i\hbar, \quad [\hat{\mathbf{p}}, r^2] = -2i\hbar\mathbf{r}, \quad (11.8)$$

откуда

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{r})(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) + \hat{\mathbf{p}}r^2\hat{\mathbf{p}} = r^2\hat{\mathbf{p}}^2 - (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})^2 + i\hbar(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}). \quad (11.9)$$

Далее имеем

$$\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\mathbf{r}\nabla = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r}, \quad (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})^2 = -\hbar^2 \left(r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial}{\partial r^2} \right). \quad (11.10)$$

В итоге из уравнения (11.9) получаем

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{p}}^2 &= \frac{(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})^2}{r^2} - i \frac{\hbar(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})}{r^2} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r^2} \right) - \hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} = \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} \equiv -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2}.\end{aligned}\quad (11.11)$$

Из этого выражения, очевидно, следует $[\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{\mathbf{L}}] = 0$.

Стационарное уравнение Шредингера для частицы в центральном поле принимает вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + U(r) \right] \psi = E\psi. \quad (11.12)$$

Мы определили (см. формулу (10.61)) вид оператора $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hbar^2 \hat{l}^2$ и его собственные функции в сферической системе координат. Так что волновую функцию стационарных состояний движения частицы с определенными значениями $\mathbf{L}^2$, L_z в произвольном поле сферической симметрии можно записать в виде

$$\psi_{E,l,m}(r, \theta, \varphi) = f_{E,l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (11.13)$$

где $f_{E,l}(r)$ – радиальная часть волновой функции, вид которой зависит от энергии E и значения $\mathbf{L}^2$ (или l). Поскольку в поле сферической симметрии нет выделенных направлений в пространстве, то радиальная функция $f(r)$ не может зависеть от значения квантового числа m . Заметим, что в случае дискретного спектра энергий, когда значения энергии принимают дискретные значения $E = E_n$, индекс E у волновых функций обычно заменяется на n , как это мы сделали в разделе 10.7 при рассмотрении атома в магнитном поле.

Подставив в уравнение Шредингера волновую функцию (11.13) для $f_l(r)$ (индекс E для краткости опускаем), получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 f_l}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df_l}{dr} \right) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right] f_l = E f_l. \quad (11.14a)$$

Представив радиальную часть в виде $f_l(r) = R_l(r)/r$, находим уравнение для радиальной функции $R_l(r) = r f_l(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R_l}{dr^2} + \left[U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R_l = E R_l. \quad (11.14б)$$

Оно определяет спектр энергий системы. Поскольку функция $f_l(r)$ при $r = 0$ должна быть конечной, то функция $R_l(r)$ должна равняться нулю при $r = 0$.

Каждое из стационарных состояний с определенным значением l будет $(2l + 1)$ -кратно вырождено $2l + 1$ значениям m соответственно.

Таким образом, для радиальной функции мы получили одномерное уравнение Шредингера на полупрямой ($r \geq 0$) в эффективном потенциальном поле $U_l(r)$

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}, \quad (11.15)$$

где второе слагаемое носит название *центробежного потенциала (центробежной энергии)*. В отличие от одномерной задачи на всей оси $(-\infty, \infty)$ здесь $R_l(0) = 0$.

Заметим, что интегралом движения является также четность, поскольку оператор инверсии коммутирует с гамильтонианом частицы в центральном поле. Из свойств функции Y_{lm} вытекает, что четность состояния есть $(-1)^l$ (см. равенство (10.79)).

11.2. О физическом смысле центробежного потенциала

Рассмотрим с классической точки зрения движение частицы с энергией $E = m\dot{x}^2 / 2$ вдоль оси x (на минимальном расстоянии b от силового центра с радиусом R , рис. 11.1). Видим, что с точки зрения радиального движения (т. е. изменения координаты r) частица сначала приближается к центру до минимального расстояния b , а потом, как будто бы оттолкнувшись от невидимого барьера, удаляется от него. Это и есть центробежный барьер.

Действительно, вычислим радиальную кинетическую энергию $m\dot{r}^2 / 2$, связанную с радиальной скоростью $\dot{r}$. Имеем

$$r = \sqrt{x^2 + b^2},$$

соответственно,

$$\dot{r} = \frac{1}{2r} 2x\dot{x} = \frac{x\dot{x}}{r}.$$

Тогда радиальная энергия будет равна

$$\frac{m\dot{r}^2}{2} = \frac{mx^2\dot{x}^2}{2r^2} = \frac{m(r^2 - b^2)\dot{x}^2}{2r^2} = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{L^2}{2mr^2},$$

где $L = m\dot{x}b$ – момент импульса частицы.

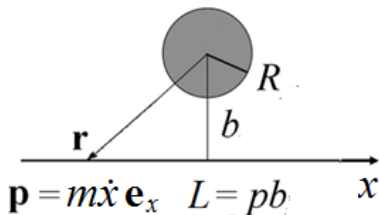


Рис. 11.1. Движение частицы вдоль оси x с импульсом $m\dot{x}$ на минимальном (прицельном) расстоянии b от силового центра. При $R < b$ полная энергия частицы совпадает с кинетической $E = m\dot{x}^2 / 2$, $L = pb$ – момент импульса частицы

Таким образом, с точки зрения радиального движения полная энергия частицы E представляется в виде суммы кинетической энергии радиального движения и центробежного потенциала:

$$E = \frac{m\dot{x}^2}{2} = \frac{m\dot{r}^2}{2} + \frac{L^2}{2mr^2}.$$

Именно так центробежный потенциал и входит в радиальное уравнение Шредингера (11.14а). В области действия сил к кинетической энергии добавится потенциальная энергия $U(r)$, так что эффективная потенциальная энергия $U_l(r)$ для частицы с моментом l будет даваться выражением (11.15). Причина появления такого фиктивного потенциала в том, что координатная сетка в сферической системе координат является криволинейной.

11.3. Асимптотическое поведение радиальной волновой функции при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$

11.3.1. Сначала рассмотрим случай асимптотики при $r \rightarrow 0$

1. Предположим, что при $r \rightarrow 0$ $r^2 U(r) \rightarrow 0$. Уравнение (11.14б) при этом запишется в виде

$$r^2 \frac{d^2 R_l}{dr^2} - l(l+1) R_l = 0. \quad (11.16)$$

Будем искать решение в виде $R_l = r^\lambda$, подставляя его в уравнение (11.16). Получаем

$$\lambda(\lambda-1) - l(l+1) = 0. \quad (11.17)$$

Корнями этого уравнения, очевидно, будут $\lambda_1 = l + 1$, $\lambda_2 = -l$. Чтобы решение $f_l(r)$ было конечным (регулярным) при $r \rightarrow 0$, мы должны выбрать корень $\lambda_1 = l + 1$. Следовательно, при $r \rightarrow 0$ радиальная волновая функция ведет себя как

$$f_l(r) = \frac{R_l(r)}{r} = \text{const} \cdot r^l. \quad (11.18)$$

Заметим, что при $r = 0$ отлична от нуля только волновая функция f_l с $l = 0$ (функция s-состояния). Все волновые функции $f_l(r)$ с отличными от нуля орбитальными моментами при $r = 0$ обращаются в нуль.

2. Если же потенциальная энергия ведет себя как

$$\frac{2m}{\hbar^2} U(r) = -\frac{a}{r^2}, \quad (11.19)$$

то вместо равенств (11.16, 11.17) получаем

$$r^2 \frac{d^2 R_l}{dr^2} + [a - l(l+1)] R_l = 0 \quad (11.20)$$

и

$$\lambda(\lambda-1) + a - l(l+1) = 0. \quad (11.21)$$

Корнями (11.21) являются

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - a}. \quad (11.22)$$

Как видим из равенства (11.22), при $a > l(l+1) + 1/4$ корни становятся комплексными:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(1 \pm i \sqrt{4a - 1 - 4l(l+1)} \right) \equiv \frac{1}{2} (1 \pm i\gamma), \quad (11.23)$$

где $\gamma = \sqrt{4a - 1 - 4l(l+1)}$. В этом случае конечных решений $f_l(r)$ уравнения Шредингера (11.12) при $r \rightarrow 0$ не существует. Одно из них ведет себя как $r^{-1/2} \exp(i\gamma \ln r)$, другое – как $r^{-1/2} \exp(-i\gamma \ln r)$, так что общее решение

$$f_l(r) = \frac{R_l(r)}{r} \sim C \cdot r^{-1/2} \cos(\gamma \ln r + \alpha). \quad (11.24)$$

Эта функция при $r \rightarrow 0$ имеет бесконечное число нулей, поскольку $\ln r \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow 0$. Но из решения одномерной задачи о частице в потенциальной яме мы помним, что число узлов (нулей) волновой функции совпадает с номером уровня, отсчитываемого от основного состояния (основное состояние в одномерном случае не имеет нулей). Наличие бесконечного числа нулей означает, что основное состояние находится при $E_0 = -\infty$. Но поскольку в любом состоянии дискретного спектра частица в основном находится в области $E > U$, то $E = -\infty$ будет означать, что частица находится в бесконечно малой области вокруг начала координат. Этот результат соответствует классическому падению частицы на центр.

11.3.2. Асимптотика при $r \rightarrow \infty$

Рассмотрим теперь асимптотическое поведение радиальной волновой функции при $r \rightarrow \infty$.

1. Пусть $U(r)$ убывает быстрее, чем r^{-1} при $r \rightarrow \infty$, тогда уравнение (11.14) в пренебрежении потенциалами запишется как

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R_l}{dr^2} = E R_l. \quad (11.25)$$

Для случая $E > 0$, полагая

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (11.26)$$

будем иметь

$$R_l(r) \sim c_1 e^{ikr} + c_2 e^{-ikr}. \quad (11.27)$$

Все значения k допустимы, так что спектр энергии сплошной.

Для случая $E < 0$ при

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \quad (11.28)$$

получаем

$$R_l(r) \sim c_1 e^{\kappa r} + c_2 e^{-\kappa r}. \quad (11.29)$$

Если выбрать конечное при $r = 0$ решение $f_l(r)$, то, вообще говоря, оба коэффициента в соотношении (11.29) будут отличны от нуля. Лишь при определенных значениях энергии $c_1 = 0$. Это и есть собственные значения энергии. Как правило, они зависят от l . Радиальная волновая функция $f_l(r)$ при этом имеет асимптотику

$$f_l(r) = \frac{R_l(r)}{r} \sim \frac{c \cdot e^{-\kappa r}}{r}. \quad (11.30)$$

2. Если при $r \rightarrow \infty$ $U(r)$ убывает, как $-q^2/r$, тогда асимптотика видоизменяется. При $E > 0$, полагая $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, $q^2 = \hbar^2 \beta / 2m$, для уравнения (11.14а) получаем

$$\frac{d^2 R_l}{dr^2} + \left(k^2 + \frac{\beta}{r} \right) R_l = 0. \quad (11.31)$$

Ищем решение в виде

$$R_l = r^\lambda e^{\alpha r}. \quad (11.32)$$

Подставляя в равенство (11.31), будем иметь

$$\lambda(\lambda+1)r^{\lambda-2} + 2\lambda\alpha r^{\lambda-1} + \alpha^2 r^\lambda + k^2 r^\lambda + \beta r^{\lambda-1} = 0. \quad (11.33)$$

Оставляя главные члены, получаем

$$\begin{aligned} \alpha^2 &= -k^2, \quad \alpha = \pm ik; \\ \lambda &= -\frac{\beta}{2\alpha} = \pm i \frac{\beta}{2k}. \end{aligned} \quad (11.34)$$

Таким образом, при $r \rightarrow \infty$ и $E > 0$ асимптотика имеет вид

$$f_l \sim \frac{c_1}{r} r^{i\frac{\beta}{2k}} e^{ikr} + \frac{c_2}{r} r^{-i\frac{\beta}{2k}} e^{-ikr} = \frac{c_1}{r} e^{i\left(kr + \frac{\beta}{2k} \ln r\right)} + \frac{c_2}{r} e^{-i\left(kr + \frac{\beta}{2k} \ln r\right)}. \quad (11.35)$$

При $r \rightarrow \infty$ и $E < 0$ ($E = -\hbar^2 \kappa / 2m$) вместо равенств (11.34) получим

$$\alpha^2 = \kappa^2, \quad \alpha = \pm \kappa; \quad \lambda = -\frac{\beta}{2\alpha} = \mp \frac{\beta}{2\kappa}, \quad (11.36)$$

а вместо соотношения (11.35) будем иметь

$$f_l \sim \frac{c}{r} r^{\frac{\beta}{2\kappa}} e^{-\kappa r}. \quad (11.37)$$

11.4. Частица в сферической яме прямоугольной формы

Задача о частице в прямоугольной потенциальной яме (рис. 11.2) глубиной U_0 и радиусом a является простейшим примером, на котором могут быть пояснены некоторые принципиальные вопросы. Кроме того, эта задача служит основой для формулировки методов приближенного решения ряда задач, не поддающихся точному решению. Радиальная волновая функция R_l удовлетворяет уравнению (11.14б), которое мы перепишем в виде

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R_l}{dr^2} + \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R_l = 0. \quad (11.38)$$

При малых r она должна себя вести как r^{l+1} (см. равенство (11.18)), т. е. удовлетворять граничному условию $R_0(0) = 0$ и экспоненциально (11.30) убывать при $r \rightarrow \infty$.

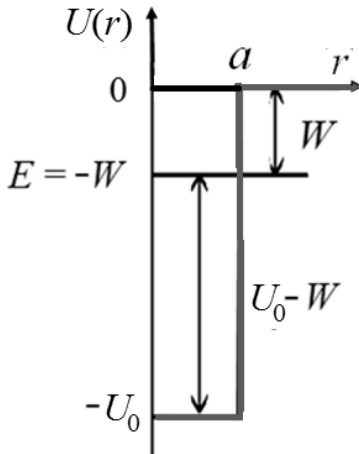


Рис. 11.2. Потенциал сферической прямоугольной ямы: $U(r) = -U_0$ ($U_0 > 0$) при $r < a$; $U(r) = 0$ при $r \geq a$. W – энергия связи; $(U_0 - W) = \hbar^2 k^2 / 2m$ – кинетическая энергия внутри ямы

При $U(r) < 0$ возможны связанные состояния с отрицательными энергиями $E < 0$, из них низшему (основному) энергетическому состоянию отвечает $l = 0$ (s-состояние), так как при $l \neq 0$ появляется центробежное отталкивание, приводящее к положительной добавке к энергии.

Сначала рассмотрим случай $l = 0$ (s-состояния). Для функций R_0 таких состояний из равенства (11.38) при $r < a$ имеем

$$\frac{d^2 R_0}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [U_0 - W] R_0 = 0, \quad (11.39)$$

где $W = -E$ – энергия связи связанного состояния с энергией $E < 0$. Величина $U_0 - W$ есть не что иное, как кинетическая энергия частицы внутри ямы (см. рис. 11.2).

Решение уравнения (11.39), которое обращается в нуль при $r = 0$, имеет вид

$$R_0 = A \sin kr, \quad r < a, \quad (11.40)$$

где

$$k = \frac{\sqrt{2m(U_0 - W)}}{\hbar}. \quad (11.41)$$

При $r \geq a$ имеем

$$\frac{d^2 R_0}{dr^2} - \gamma^2 R_0 = 0, \quad (11.42)$$

где

$$\gamma = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}. \quad (11.43)$$

Решение (11.42), убывающее на бесконечности, имеет вид

$$R_0 = B e^{-\gamma r}, \quad r \geq a. \quad (11.44)$$

Мы теперь должны сшить решения уравнений (11.40) и (11.44) на границе ямы. Из условия непрерывности R_0 и ее производной следует также непрерывность и логарифмической производной R_0'/R_0 (производной от $\ln R_0$). Используя это условие при $r = a$, получаем $k \operatorname{ctg} ka = -\gamma$ или, учитывая равенства (11.41, 11.43),

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{\gamma}{k} = -\sqrt{\frac{W}{U_0 - W}}. \quad (11.45)$$

Это трансцендентное уравнение определяет дискретные уровни энергии $E = -W$ частицы в яме. Вводя безразмерные величины

$$\xi = ka \geq 0, \quad \eta = \gamma a \geq 0$$

из соотношения (11.45) с учетом уравнений (11.41) и (11.43) получаем

$$\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi, \quad \eta^2 + \xi^2 = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}. \quad (11.46)$$

Уравнения (11.46) можно решить либо численно, либо графически. В последнем случае значения η и ξ , удовлетворяющие одновременно обоим уравнениям (11.46), определяются точками пересечения кривой $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ с окруж-

ностью радиуса $a\sqrt{2mU_0/\hbar^2}$. На рисунке 11.3 изображены кривые $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ и три окружности, отвечающие разным глубинам ямы. Окружность 1 соответствует неравенству

$$\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} < \frac{\pi^2}{4}. \quad (11.47)$$

В этом случае отсутствует пересечение и, следовательно, нет стационарных состояний с отрицательной энергией. Частица не задерживается в яме и может уходить в бесконечность, т. е. отсутствуют связанные состояния. Величина U_0a^2 называется *мощностью ямы*, и этой мощности не хватает, чтобы удержать частицу в яме. Окружность 2 соответствует радиусу и глубине ямы, при которых выполняется неравенство

$$\frac{\pi^2}{4} \leq \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} < \frac{9\pi^2}{4}. \quad (11.48)$$

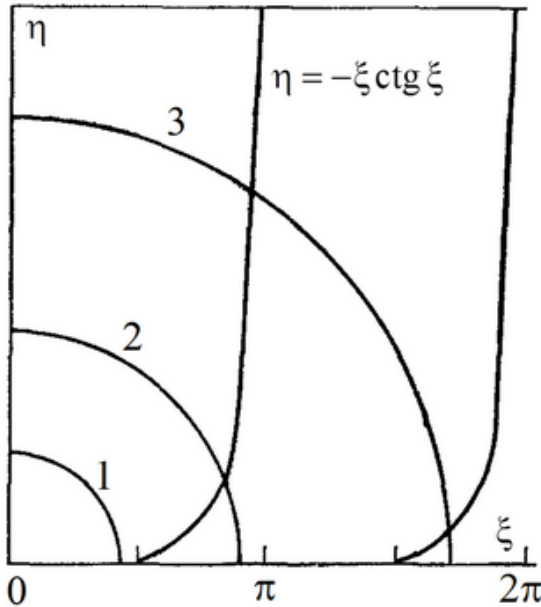


Рис. 11.3. Графическое решение уравнений (11.46)

В этом случае имеется одно пересечение — одно состояние с отрицательной энергией. Эту энергию можно определить по значению η_1 , соответствующему точке пересечения кривых по формуле

$$E_1 = -W_1 = -\frac{\hbar^2 \gamma_1^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \eta_1^2}{2ma^2}, \quad (11.49)$$

которая следует из уравнений (11.43) и (11.46). Кривая 3 соответствует такой мощности ямы U_0a^2 , при которой в ней имеются два связанных состояния.

Таким образом, в отличие от одномерного случая в трехмерной яме связанного уровня не существует, если при данном радиусе a глубина ямы U_0 недостаточно велика (см. неравенство (11.47)). Уровень появляется, когда ее глубина становится равной

$$U_0 = \frac{\pi^2}{4} \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (11.50a)$$

Это объясняется тем, что функция R_0 для основного состояния имеет один узел (при $r = 0$) и соответствует не основному состоянию в одномерной яме (волновая функция которого не имеет узлов), а первому возбужденному. Ясно, что это обстоятельство не является свойством лишь прямоугольной ямы, а имеет общий характер.

При дальнейшем углублении ямы появляются второй, третий и так далее уровни. Условие появления n -го уровня есть

$$U_0 = \frac{(2n-1)^2 \pi^2}{4} \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (11.50б)$$

11.5. Слабосвязанное основное состояние частицы

Важным специальным случаем является слабосвязанное состояние, для которого $W \ll U_0$, так что уровень лежит близко к границе сплошного спектра. Примерами могут служить дейтрон или отрицательный атомный ион.

В этом случае из уравнения (11.45) имеем

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{\gamma}{k} = -\sqrt{\frac{W}{U_0 - W}} \approx -\sqrt{\frac{W}{U_0}}, \quad |\operatorname{ctg} ka| \ll 1, \quad (11.51)$$

т. е. $\operatorname{ctg} ka < 0$ и мал по величине, следовательно, ka слегка превышает $\pi/2$. При $ka = \pi/2$ уровень выходит на поверхность ($W = 0$). Условие $ka = \pi/2$ в силу уравнения (11.41) совпадает с формулой (11.50а). При этом, как следует из соотношений (11.51), $\gamma a \ll 1$. Это условие означает, что радиус волновой функции вне ямы, т. е. характерная величина $1/\gamma$ значительно превышает размер самой потенциальной ямы. Такая особенность волновой функции свойственна не только слабосвязанному состоянию в прямоугольной яме, но и любой другой короткодействующей яме произвольной формы.

Действительно, изобразим волновую функцию (рис. 11.4) такого слабосвязанного состояния, описываемую выражениями (11.40, 11.44), с учетом равенства (11.51).

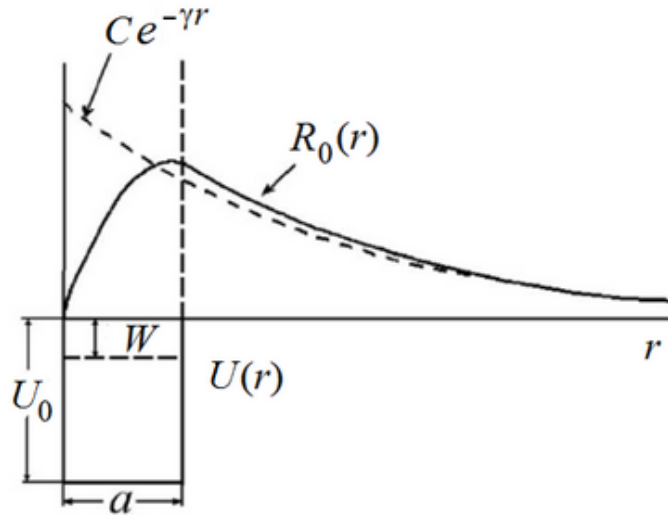


Рис. 11.4. Графическое изображение волновой функции слабосвязанного уровня

Можно устремить радиус ямы к нулю, а глубину – к бесконечности (*модель потенциала нулевого радиуса*), так чтобы произведение $U_0 a^2$ (мощность ямы) оставалось постоянным, не изменяя при этом положения уровня (см. равенства (11.46) и рис. 11.3). Тогда область, занимаемая внутренней функцией, будет стремиться к нулю и частица с подавляющей вероятностью будет находиться вне ямы. По этой причине нормированная волновая функция $R_0(r) = C \exp(-\gamma r)$ оказывается достаточно близка к истинной функции и с хорошей точностью может использоваться во многих расчетах. А поскольку для другой формы потенциала $R_0(r)$ заметно изменяется только при $r < a$, то эта функция близка к истинной для любой другой формы короткодействующего потенциала. Хотя в этом приближении волновая функция $f_l(r)$ при $r = 0$ обращается в бесконечность, она может быть нормирована, причем основной вклад в нормировочный интеграл дает область $r > a$. Поэтому нормированная функция

$$R_0(r) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} e^{-\gamma r} \quad (11.52)$$

является хорошим приближением для многих расчетов.

Также можно показать, что у частицы при наличии слабосвязанного основного s-состояния с энергией связи

$$W = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} \quad (11.53)$$

не может быть возбужденных состояний (т. е. состояний с меньшими энергиями связи) с более высокими орбитальными моментами.

Действительно, оценим энергию центробежного отталкивания для $l = 1$ при $r \sim \gamma^{-1}$. Она равна

$$U_l^{\text{цб}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}, \quad U_1^{\text{цб}}(r) = 2 \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} = 2W, \quad (11.54)$$

т. е. удвоенной энергии связи.

Таким образом, если силы взаимодействия являются центральными, уже p -состояние должно лежать в области непрерывного спектра.

11.6. Состояния частицы с ненулевым орбитальным моментом

Обратимся теперь к случаю $l \neq 0$. Предварительно приведем некоторые необходимые в дальнейшем сведения из теории функций Бесселя. Представим уравнение (11.14) в виде

$$\frac{d^2 f_l}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df_l}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_l = 0 \quad (11.55)$$

и рассмотрим похожее уравнение

$$\frac{d^2 f_l}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{df_l}{dz} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right] f_l = 0. \quad (11.56)$$

Его решение называется *сферической функцией Бесселя*. С помощью элементарных выкладок можно показать, что уравнение (11.56) эквивалентно системе уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{1}{z^{l+1}} \frac{d}{dz} (z^{l+1} f_l) &= f_{l-1}, \\ z^{l-1} \frac{d}{dz} (z^{-l+1} f_{l-1}) &= -f_l. \end{aligned} \quad (11.57)$$

Для того чтобы в этом убедиться, нужно выражение для f_{l-1} из первого уравнения (11.57) подставить во второе уравнение. Уравнениями (11.57) можно воспользоваться для рекуррентного построения функций f_l . Начнем с f_0 .

Произведение $f_0 z$ удовлетворяет уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} (z f_{-1}) &= -f_0 z, \\ \frac{d}{dz} (z f_0) &= f_{-1} z. \end{aligned}$$

Дифференцируя второе из них, имеем

$$\frac{d^2}{dz^2} (z f_0) + f_0 z = 0. \quad (11.58)$$

Выбирая различные линейно независимые решения уравнения (11.58), получаем разные виды сферических бесселевых функций. Так, выбирая его решения в виде $\sin z$ и $-\cos z$, получаем сферические функции Бесселя $j_0(z)$ и Неймана $n_0(z)$

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}, \quad n_0(z) = -\frac{\cos z}{z}. \quad (11.59)$$

Выбирая решения в виде $\exp(\pm iz)$, получаем сферические функции Ханкеля

$$h_0^{(1)}(z) = \frac{e^{iz}}{iz}, \quad h_0^{(2)}(z) = -\frac{e^{-iz}}{iz}. \quad (11.60)$$

Далее из второго уравнения (11.57) для f_1 имеем

$$\frac{d}{dz}(f_0) = -f_1,$$

т. е.

$$\begin{aligned} j_1(z) &= \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z}, \quad n_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z}, \\ h_1^{(1)}(z) &= \frac{1}{i} \left(\frac{1}{z^2} - \frac{i}{z} \right) e^{iz}, \quad h_1^{(2)}(z) = -\frac{1}{i} \left(\frac{1}{z^2} + \frac{i}{z} \right) e^{-iz} \end{aligned} \quad (11.61)$$

и т. д. Между функциями j_l , n_l и $h_l^{(1)}$ и $h_l^{(2)}$ существуют соотношения, вытекающие из их определения:

$$h_l^{(1),(2)}(z) = j_l(z) \pm in_l(z). \quad (11.62)$$

При $z \rightarrow 0$ функции j_l и n_l ведут себя как

$$\begin{aligned} j_l &= \frac{z^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l+1)} \left[1 - \frac{z^2}{2(2l+3)} + \dots \right], \\ n_l &= -\frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l-1)}{z^{l+1}} \left[1 - \frac{z^2}{2(1-2l)} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (11.63)$$

При $z \rightarrow \infty$ их асимптотики имеют вид

$$\begin{aligned} j_l(z) &\sim \frac{\sin\left(z - \frac{l\pi}{2}\right)}{z}, \quad n_l(z) \sim -\frac{\cos\left(z - \frac{l\pi}{2}\right)}{z}, \\ h_l^{(1),(2)} &\sim \pm \frac{1}{iz} e^{\pm i\left(z - \frac{l\pi}{2}\right)}. \end{aligned} \quad (11.64)$$

Вернемся к уравнению Шредингера (11.55). Внутри ямы оно принимает вид

$$\frac{d^2 f_l}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df_l}{dr} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_l = 0, \quad (11.65)$$

вне ямы –

$$\frac{d^2 f_l}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df_l}{dr} + \left[(i\gamma)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_l = 0. \quad (11.66)$$

Переходя в этих уравнениях к переменным $z = kr$ и $z' = i\gamma r$, где k и γ определяются, как и ранее, выражениями (11.41, 11.43), получаем уравнения Бесселя (11.56).

Таким образом, решения уравнений (11.65) и (11.66), представляющие собой радиальные волновые функции частицы в прямоугольной потенциальной яме, выражаются через функции Бесселя.

Внутри ямы при $r < a$ с учетом конечности волновой функции в нуле имеем

$$f_l = A j_l(z) = A j_l(kr), \quad (11.67)$$

вне ямы при $r \geq a$ –

$$f_l = B h_l^{(1)}(z') = B h_l^{(1)}(i\gamma r). \quad (11.68)$$

В случае s -состояний с $l = 0$ мы сшивали на границе внешней и внутренней областей при $r = a$ логарифмические производные функции $R_0 = r f_0$. При $l \neq 0$ для сшивки решений удобно приравнивать на границе ямы при $r = a$ логарифмические производные F_l величины $r^{l+1} f_l$, т. е.

$$F_l = \frac{1}{r^{l+1} f_l} \frac{d(r^{l+1} f)_l}{dr}. \quad (11.69)$$

При $l = 0$ она совпадает с использованной нами для s -состояний.

Рассмотрим слабосвязанное состояние $\gamma a \ll 1$. Вычислим величину F_l для внешней области, используя выражение (11.68) для f_l . Принимая во внимание поведение функции Ханкеля при малых $|z|$ (11.62, 11.63)

$$h_l^{(1)}(z) = j_l(z) + i n_l(z) \approx i n_l \sim \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l-1)}{(\gamma r)^{l+1}} \left[1 + \frac{(\gamma r)^2}{2(2l-1)} + \dots \right], \quad (11.70)$$

получаем

$$F_l(a) = \frac{\gamma^2 a}{2l-1}. \quad (11.71)$$

При $\gamma^2 = 0$ ($W = 0$) появляется уровень с $l \neq 0$, F_l обращается в нуль, как и в случае $l = 0$. Подставив равенство (11.67) в выражение для F_l во внутренней области и учитывая (11.57), получим

$$\left. \frac{1}{r^{l+1} f_l} \frac{d(r^{l+1} f)_l}{dr} \right|_{r=a} \equiv \frac{k^{l+1}}{z^{l+1} f_l} \frac{d(z^{l+1} f)_l}{k^l dz} = \frac{f_{l-1}}{k^l a^{l+1} f_l} = \frac{\gamma^2 a}{2l-1}. \quad (11.72)$$

Таким образом, условием появления уровня с $l \neq 0$ является

$$f_{l-1}(ka) = f_{l-1} \left(\sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}} \right) = 0. \quad (11.73)$$

При $\gamma \neq 0$ логарифмическая производная F_l существенно отличается от случая $l = 0$ в том отношении, что F_l пропорционально радиусу ямы a , тогда как F_0 от него не зависит. При $l = 0$ даже сингулярная функция $f_l = A \exp(-\gamma r)/r$ в приближении нулевого радиуса нормируема, тогда как в случае $l \neq 0$ нормировочный интеграл при $a \rightarrow 0$ расходится. Поэтому модель потенциала нулевого радиуса при $l \neq 0$ неприменима.

11.7. Кулоновское поле. Водородоподобный атом

Рассмотрим движение частицы в кулоновском поле притяжения, например электрона в поле ядра с зарядом Z . Потенциальная энергия взаимодействия в этом случае имеет вид

$$U(r) = -\frac{e^2 Z}{r}. \quad (11.74)$$

Для решения этой задачи удобно использовать уравнение Шредингера (11.38) для радиальной волновой функции $R_l = r f_l$, которое запишется в виде

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R_l}{dr^2} + \left[\left(\frac{Ze^2}{r} - W \right) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R_l = 0, \quad (11.75)$$

где, как и ранее, $E = -W$; m – приведенная масса электрона и ядра (в данном случае она близка к массе электрона). Удобно в этом уравнении сделать следующие подстановки:

$$r = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} x, \quad Ze^2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} = \beta_0, \quad (\beta_0 \equiv \alpha Z \sqrt{2mc^2}), \quad (11.76)$$

тогда оно примет вид

$$\frac{d^2 R_l}{dx^2} + \left[\frac{\beta_0}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} - W \right] R_l = 0. \quad (11.77)$$

Мы должны искать решение уравнений (11.77), которое на малых расстояниях при $x \rightarrow 0$ ведет себя как x^{l+1} (см. равенство (11.18)), а на больших при

$x \rightarrow \infty$ как $R_l \sim \exp(-\sqrt{W}x)$, см. соотношение (11.37). Последнее указывает на то, что решение следует записать в виде

$$R_l = G_l(x) e^{-\sqrt{W}x}. \quad (11.78)$$

Подстановка в формулу (11.77) дает

$$\frac{d^2 G_l}{dx^2} - 2\sqrt{W} \frac{dG_l}{dx} + \left[\frac{\beta_0}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] G_l = 0. \quad (11.79)$$

Для решения этого уравнения используем метод разложения в степенной ряд, т. е. решение будем искать в виде (опускаем далее индекс l)

$$G(x) = \sum_{N=0}^{\infty} C_N x^{N+s}. \quad (11.80)$$

Мы выбрали x^{N+s} потому что, как следует уже из асимптотики (11.18), решение в общем случае начинается с x в некоторой степени, значение s найдем далее из уравнения. Подстановка выражения (11.80) в уравнение (11.79) дает

$$\begin{aligned} \sum_{N=0}^{\infty} C_N \left[(N+s)(N+s-1) x^{N+s-2} - 2(N+s)\sqrt{W} x^{N+s-1} - \right. \\ \left. + \beta_0 x^{N+s-1} - l(l+1) x^{N+s-2} \right] = 0. \end{aligned}$$

Собирая все члены с одинаковыми степенями x , получим

$$\begin{aligned} \sum_{N=0}^{\infty} x^{N+s-2} \left\{ C_N \left[(N+s)(N+s-1) - l(l+1) \right] - \right. \\ \left. - C_{N-1} \left[2\sqrt{W}(N+s-1) - \beta_0 \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (11.81)$$

Чтобы это уравнение выполнялось при произвольных x , коэффициент перед каждой степенью x должен быть равен нулю. Это приводит к следующему выражению:

$$\frac{C_N}{C_{N-1}} = \frac{2\sqrt{W}(N+s-1) - \beta_0}{(N+s)(N+s-1) - l(l+1)}. \quad (11.82)$$

Так как по предположению $C_{-1} = 0$ и $C_0 \neq 0$, то отсюда следует

$$s(s-1) = l(l+1).$$

Это уравнение определяет низшую степень x , присутствующую в разложении (11.80). Решения его имеют вид

$$s = l+1, \quad s = -l. \quad (11.83)$$

Результат $s = l+1$ находится в согласии с асимптотическим поведением функции при малых x (11.18). Поскольку в начале координат $R_l(0) = 0$, то решение с

$s = -l$ приводит к физически неприемлемой волновой функции. Поэтому единственное подходящее решение имеет вид $s = l + 1$.

Заметим, что отношение (11.82) при $N \rightarrow \infty$ стремится к величине

$$\frac{C_N}{C_{N-1}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{2\sqrt{W}}{N},$$

которая совпадает с отношением коэффициентов разложения экспоненты

$$e^{2\sqrt{W}x} = \sum_N \frac{(2\sqrt{W})^N x^N}{N!}. \quad (11.84)$$

Таким образом, при $x \rightarrow \infty$ ряд уравнений (11.80) для искомого решения $G(x)$ будет совпадать с равенством (11.84), поскольку в нем преобладают большие степени x , т. е. при $x \rightarrow \infty$:

$$G(x) \sim e^{2\sqrt{W}x}, \quad R_l = G_l(x) e^{-\sqrt{W}x} \sim e^{\sqrt{W}x}, \quad (11.85)$$

и наша волновая функция с ростом x возрастает экспоненциально, что неприемлемо с физической точки зрения. Единственным выходом может быть случай, когда ряд обрывается, тогда $G(x)$ превратится в полином конечной степени, и волновая функция $R(x)$ будет экспоненциально убывать на бесконечности, как того требует асимптотика (11.37).

Условие обрыва заключается в том, что коэффициент C_N исчезает для некоторого конечного значения $N = N_0$, которое должно быть равно, по крайней мере, единице, если решение само по себе не равно нулю. В соответствии с выражением (11.82), если принять, что $s = l + 1$, обрыв происходит при

$$2\sqrt{W}(N_0 + l) - \beta_0 = 0 \quad \text{или} \quad W = \frac{\beta_0^2}{4(N_0 + l)^2}. \quad (11.86)$$

Используя определение β_0 соотношения (11.76), получаем спектр энергий водородоподобного атома

$$E = -W = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 (N_0 + l)^2} = -\frac{\alpha^2 Z^2}{2(N_0 + l)^2} mc^2. \quad (11.87)$$

Здесь $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ – постоянная тонкой структуры; m – приведенная масса.

Величина $n = N_0 + l$ называется *главным квантовым числом*, так как именно она определяет значения энергий стационарных состояний в кулоновском поле:

$$E_n = -W_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{\alpha^2 Z^2}{2n^2} mc^2 \equiv -\frac{Z^2 W_0}{n^2}. \quad (11.88)$$

Здесь W_0 – энергия связи основного состояния атома водорода ($Z = 1$) $W_0 = 13,6$ эВ.

Поскольку ряд (11.80) обрывается на члене с $N = N_0$ (т. е. $C_{N_0} = 0$, как и все остальные $C_N = 0$ при $N > N_0$), то функция $G(x)$ равна степени x^{l+1} , умноженной на полином степени $N_0 - 1$. Можно показать, что все его $N_0 - 1$ нулей вещественны. Так что радиальная волновая функция $R(x)$, описывающая состояние с энергией E_n и орбитальным моментом l , имеет N_0 узлов, включая начало координат. Таким образом, имеем

$$R_{nl} = x^{l+1} p_{N_0-1}^l(x) e^{-\sqrt{W}x}, \quad (11.89)$$

где $p_{N_0-1}^l(x)$ – полином степени $N_0 - 1$. Волновая функция в начале координат ведет себя, как x^{l+1} , далее проходит через $N_0 - 1$ узлов (кроме узла при $x = 0$), и, наконец, затухает экспоненциально. Величина $n_r = N_0 - 1$, равная степени полинома $p_{n_r}^l(x)$ или числу узлов радиальной функции (кроме расположенного в начале координат), называется *радиальным квантовым числом*. Главное квантовое число часто записывают и так: $n = N_0 + l = n_r + l + 1$.

11.7.1. Вырождение энергетических уровней атома водорода

Мы видим, что энергетические уровни атома водорода зависят только от главного квантового числа n , но не от l или N_0 по отдельности. Поэтому может быть несколько различных квантовых состояний с одной и той же энергией, но разными N_0 и l , т. е. уровни могут быть вырожденными. Наинижнему состоянию соответствует $n = 1$. В этом случае радиальная волновая функция имеет только один узел в начале координат, т. е. $N_0 = 1$. Так как $n = N_0 + l$, то для этого состояния $l = 0$. Следовательно, это состояние не вырождено, так как имеется только одна волновая функция с $n = 1$, именно та, для которой $l = m = 0$. Следующее состояние имеет $n = 2$. Ему соответствуют четыре возможных состояния. Три из них реализуются, когда радиальная функция имеет один узел ($N_0 = 1$) и $l = 1$; в этом случае m может принимать три значения: $-1, 0, 1$. Еще одно состояние, когда имеются два узла радиальной функции: ($N_0 = 2$) и $l = m = 0$. При больших главных квантовых числах степень вырождения возрастает.

Поскольку $N_0 = 1, 2, 3, \dots$, а $l = 0, 1, 2, \dots$, то главное квантовое число n пробегает положительные значения начиная с 1. Энергия зависит только от n , т. е. от суммы квантовых чисел N_0 и l . Состояния с определенной энергией и определенным моментом обозначаются кратко как nl , при этом вместо чисел $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ пишутся соответствующие латинские буквы $s, p, d, f, \dots$ и т. д. Таким образом, при $n = 1$ имеется одно состояние $1s$; при $n = 2$ – два состояния: $2s$ и $2p$, из которых второе трехкратно вырождено по проекциям момента или, как их называют, по магнитным квантовым числам m ; при $n = 3$ имеются состояния $3s, 3p, 3d$ и т. д. В общем случае каждому уровню с главным квантовым числом n соответствует n состояний, отличающихся квантовыми числами $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Кроме того, каждое состояние с определенным l вырождено

$2l + 1$ раз по значениям $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, поэтому общая кратность вырождения стационарного состояния с квантовым числом n будет равна

$$w_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = (n - 1)n + n = n^2. \quad (11.90)$$

Это так называемое *случайное вырождение* по l имеет место только в кулоновском поле и еще в потенциале трехмерного изотропного гармонического осциллятора (см. ниже). Наиболее ярко оно проявляется только в атоме водорода.

В более тяжелых атомах с несколькими электронами энергия зависит не только от n , но и от l , т. е. происходит расщепление уровней по значению l . Это вызвано тем, что потенциальная энергия данного электрона в атоме с несколькими электронами является не чисто кулоновской, равной $-Ze^2/r$, а изменена экранирующим действием остальных электронов. Чем больше отклонение от кулоновского потенциала, тем больше будет различие в энергии между уровнями с одним и тем же n , но разными l (рис. 11.5).

Так как наибольшие отклонения характерны для наиболее тяжелых атомов, то в общем случае с ростом номера атома возрастает и расстояние между уровнями с одинаковым n и различными l . Даже в атоме водорода вырождение уровней по l можно удалить наложением внешнего электрического поля, которое вызывает изменение энергии каждого уровня на величину, зависящую от l . Это явление называется *эффектом Штарка первого порядка*.

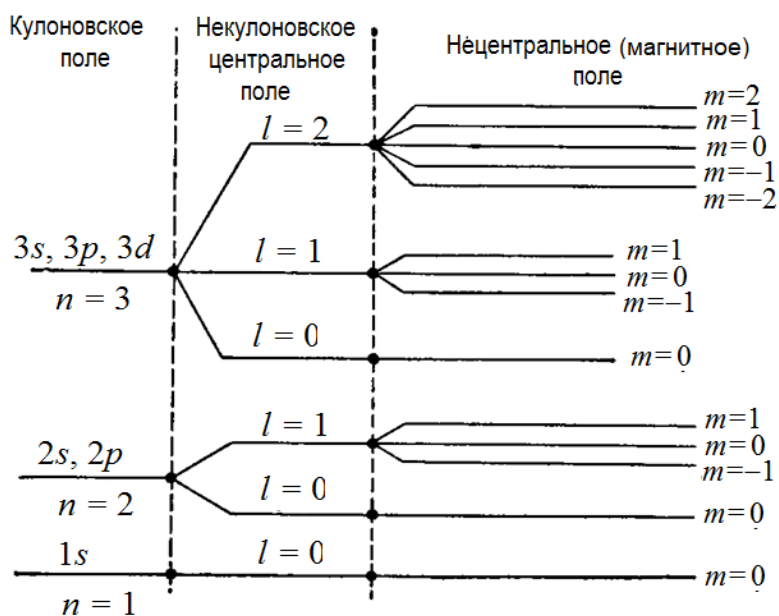


Рис. 11.5. Схематическая диаграмма, указывающая вырождение различных энергетических уровней атома водорода и способы снятия этого вырождения

Как мы уже обсуждали, вырождение по проекциям орбитального момента m снимается приложением магнитного поля (эффект Зеемана). Знаки и

величины смещений энергетических уровней могут меняться в зависимости от типа взаимодействия, так что измерение расщеплений атомных уровней, например в оптических спектрах атомов, позволяет изучать эти взаимодействия.

В заключение этого раздела заметим, что полиномы, являющиеся решением уравнения (11.79), изучались независимо от задачи об атоме водорода Лагерром задолго до того, как было получено уравнение Шредингера. Полиномы Лагерра являются частными случаями класса так называемых *вырожденных гипергеометрических функций*. Подробнее о них можно узнать из курсов квантовой механики, упоминавшихся ранее (см., например, Д. Бом. Квантовая теория. М.: Наука, 1965 или Э. Ферми. Квантовая механика: конспект лекций. М.: Мир, 1965).

11.7.2. Примеры волновых функций низших уровней водородоподобного атома

Получим, используя рекуррентные соотношения (11.82), волновые функции нескольких наиболее низколежащих состояний водородоподобного атома.

1s-состояние: $n = 1$, $N_0 = 1$, $l = 0$.

Переходя от x к координате r , имеем $C_1 = 0$, $C_0 \neq 0$, т. е.

$$R_{1s}(r) = C_0 x e^{-Z\sqrt{W_0}x} = C_0 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} r e^{-\frac{Ze^2m}{\hbar^2}r} \equiv A r e^{-\frac{Zr}{a_0}},$$

где величины энергии связи $Z^2 W_0$ и длины затухания волновой функции a_0/Z ,

$$W_0 = \frac{e^4 m}{2\hbar^2} = \frac{\alpha^2 m c^2}{2}, \quad a_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mW_0}} = \frac{\hbar^2}{e^2 m} \equiv \frac{\lambda_c}{\alpha}, \quad (11.91)$$

совпадают, соответственно, с боровской энергией связи (с точностью до отличия приведенной массы от массы электрона) основного состояния атома водорода ($Z = 1$) $W_0 = 13,6$ эВ и радиусом первой боровской орбиты (боровским радиусом) $a_0 = r_B = 0,529$ Å (см. соотношения (1.33, 1.35)). Энергия связи W_n n -го состояния водородоподобного атома с $Z \neq 1$ и длина затухания a_n соответствующей волновой функции будут

$$W_n = \frac{Z^2}{n^2} W_0 = \frac{Z^2}{n^2} \frac{e^4 m}{2\hbar^2}, \quad a_n = \frac{n a_0}{Z} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mW_n}} = \frac{n}{Z} \frac{\hbar^2}{e^2 m}. \quad (11.92)$$

Заметим, что длины затухания a_n для состояний с $n > 1$ совсем не совпадают с боровскими радиусами r_n (1.31). Величинами, соответствующими радиусам боровских орбит, являются средние расстояния $\langle r \rangle$ электрона до ядра, которые определяются объемными распределениями электронной плотности в атоме и вычисляются при помощи волновых функций.

Константа A (или C_0) определяется из условия нормировки

$$\int_0^{\infty} |R_{1s}|^2 dr = |A|^2 \int_0^{\infty} r^2 e^{-\frac{2Z}{a_0}r} dr = 2 \left(\frac{a_0}{2Z} \right)^3 |A|^2 = |A|^2 \left(\frac{a_0}{Z} \right)^3 \frac{1}{4} = 1,$$

так что

$$A = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2}, \quad C_0 = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \quad (11.93)$$

и

$$R_{1s}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} r e^{-\frac{Zr}{a_0}} \equiv 2 \sqrt{\frac{Z}{a_0}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{a_0}}. \quad (11.94)$$

Вспоминая выражение (10.7) для нулевой сферической гармоник $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$, для полной волновой функции $1s$ -состояния получаем

$$\psi_{1s} = f_{1s} Y_{00} = \frac{R_{1s}(r)}{r} Y_{00} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}. \quad (11.95)$$

$2s$ -состояние: $n = 2$, $N_0 = 2$, $l = 0$.

Имеем

$$\begin{aligned} R_{2s}(r) &= (C_0 x + C_1 x^2) e^{-\sqrt{W_2} x} = \\ &= C_0 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \left(r + \frac{C_1}{C_0} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} r^2 \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \equiv A \left(r + \frac{B}{A} r^2 \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}. \end{aligned}$$

Из уравнения (11.82) с использованием выражений (11.86) следует

$$\frac{C_1}{C_0} = \sqrt{W_2} - \frac{\beta_0}{2} = \sqrt{W_2} - \frac{4\sqrt{W_2}}{2} = -\sqrt{W_2},$$

т. е.

$$\frac{B}{A} = \frac{C_1}{C_0} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} = -\frac{\sqrt{2mW_2}}{\hbar} = -\frac{Z}{2a_0}.$$

В результате

$$R_{2s}(r) = A r \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}. \quad (11.96)$$

Константу A опять найдем из условия нормировки

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} |R_{2s}|^2 dr &= |A|^2 \int_0^{\infty} e^{-\frac{Z}{a_0}r} \left(r^2 - \frac{Zr^3}{a_0} + \frac{Z^2 r^4}{4a_0^2} \right) dr = \\ &= |A|^2 \left(\frac{2a_0^3}{Z^3} - \frac{6a_0^3}{Z^3} + \frac{24a_0^3}{4Z^3} \right) = \frac{2a_0^3}{Z^3} |A|^2 = 1, \end{aligned}$$

откуда

$$A = \sqrt{\frac{Z^3}{2a_0^3}} \quad (11.97)$$

и

$$R_{2s}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{2a_0^3}} r \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}. \quad (11.98)$$

2p-состояние: $n = 2, N_0 = 1, l = 1$.

Эта функция, как и 1s, не имеет узлов кроме начала координат, поэтому имеем

$$R_{2p}(r) = C_0 x^2 e^{-\sqrt{w_2}x} = Ar^2 e^{-\frac{Zr}{2a_0}}.$$

Условие нормировки –

$$\int_0^{\infty} |R_{2p}|^2 dr = |A|^2 \int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{Z}{a_0}r} dr = |A|^2 \frac{24a_0^5}{Z^5} = 1,$$

так что

$$A = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{Z^5}{6a_0^5}} \quad (11.99)$$

и

$$R_{2p}(r) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{Z^5}{6a_0^5}} \left(\frac{rZ}{a_0} \right)^2 e^{-\frac{Zr}{2a_0}}. \quad (11.100)$$

Видим, что радиальные функции $f_{nl} = R_{nl}/r$ для s-состояний при $r = 0$ отличны от нуля в соответствии с асимптотикой (11.18) и замечанием к ней.

11.8. Трехмерный изотропный гармонический осциллятор

Опять представляя волновую функцию такого осциллятора в виде

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (11.101)$$

для радиальной волновой функции будем иметь

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R_l}{dr^2} + \left[\left(-\frac{m\omega^2 r^2}{2} + W \right) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R_l = 0. \quad (11.102)$$

Энергию осциллятора будем отсчитывать от минимума потенциальной энергии, которая у нас равна нулю, поэтому положили $E = W > 0$. Как и ранее, используя переменную

$$r = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} x, \quad (11.103)$$

получим вместо формулы (11.77) уравнение

$$\frac{d^2 R_l}{dx^2} + \left[W - \beta_{01}^2 x^2 - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] R_l = 0. \quad (11.104)$$

Здесь

$$\beta_{01} = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (11.105)$$

Используя равенства (11.103, 11.105) для величины показателя экспоненты, входящей в волновую функцию пространственного осциллятора (8.63), имеем

$$\frac{r^2}{2a^2} = \frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{2a^2} = \frac{\hbar\omega}{4} x^2 = \frac{1}{2} \beta_{01} x^2, \quad \left(a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right).$$

Так что вместо равенства (11.78), в соответствии с поведением волновой функции (8.63) изотропного осциллятора, решение будем искать в виде

$$R_l = G_l(x) e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2}. \quad (11.106)$$

Тогда для $G_l(x)$ получаем уравнение

$$\frac{d^2 G_l}{dx^2} - 2\beta_{01}x \frac{dG_l}{dx} + \left[W - \beta_{01} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] G_l = 0. \quad (11.107)$$

Решение опять ищем в виде ряда

$$G_l(x) = \sum_{N=0}^{\infty} C_N x^{N+s}. \quad (11.108)$$

Подставляя его в уравнение, получаем

$$\sum_{N=0}^{\infty} C_N \left[(N+s)(N+s-1) - l(l+1) \right] x^{N+s-2} + \\ + C_N \left[(W - \beta_{01}) - 2\beta_{01}(N+s) \right] x^{N+s} = 0.$$

Приравнивание нулю коэффициентов перед одинаковыми степенями x дает

$$C_{N+2} \left[(N+s+2)(N+s+1) - l(l+1) \right] + \\ + C_N \left[(W - \beta_{01}) - 2\beta_{01}(N+s) \right] = 0.$$

В результате имеем рекуррентное соотношение

$$\frac{C_{N+2}}{C_N} = \frac{\left[2\beta_{01}(N+s) - (W - \beta_{01}) \right]}{\left[(N+s+2)(N+s+1) - l(l+1) \right]}. \quad (11.109a)$$

Поскольку $C_{-2} = 0$, а $C_0 \neq 0$, то из уравнения (11.109a) следует $s = l + 1$, а суммирование в ряду соотношения (11.108) должно начинаться с $N = 0$ и содержать только четные $N = 2k$, так что ряд соотношения (11.108) приобретает вид

$$G_l(x) = x^{l+1} \sum_{N=0}^{\infty} C_N x^N = x^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} C_{2k} x^{2k}. \quad (11.109б)$$

При $x \rightarrow 0$ результат $s = l + 1$ находится в согласии с асимптотическим поведением функции при малых x (11.18). Минимальная степень полинома достигается при $l = 0$.

Также должно быть $C_{-1} = 0$. В этом случае $C_1 \neq 0$ и из соотношения (11.109a) следует $s = l$, а сумма в ряду равенства (11.108) должна начинаться с $N = 1$ и содержать только нечетные N , так что

$$G_l(x) = x^l \sum_{N=1}^{\infty} C_N x^N = x^l \sum_{k=0}^{\infty} C_{2k+1} x^{2k+1} = x^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} C_{2k+1} x^{2k}. \quad (11.109в)$$

Как и ранее, ряд должен быть конечным, чтобы волновая функция на бесконечности обращалась в нуль. Обозначим максимальную величину N_m в разложении (11.108). Это означает, что $C_{N_m+2} = 0$, т. е.

$$W = E = 2\beta_{01}(N_m + l + 1) + \beta_{01} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right). \quad (11.110)$$

Ряды при этом обрываются и превращаются в полиномы конечной степени. Из соотношения (11.109б) получается

$$\begin{aligned}
G_l^{(+)}(x) &= x^{l+1} \sum_{N=0}^{N_m} C_N x^N = x^{l+1} (C_0 + C_2 x^2 + C_4 x^4 + \dots + C_{N_m} x^{N_m}) = \\
&= x^{l+1} \sum_{k=0}^n C_{2k} x^{2k} = x^{l+1} P_n^{(+)}(x^2).
\end{aligned} \tag{11.111}$$

Здесь величина N_m является четной, и $N_m = 2k_m \equiv 2n$, и

$$\frac{C_{N+2}}{C_N} = \frac{[2\beta_{01}(N+l+1) - (W - \beta_{01})]}{[(N+l+3)(N+l+2) - l(l+1)]}. \tag{11.112}$$

Аналогично из равенства (11.109в) будем иметь

$$\begin{aligned}
G_l^{(-)}(x) &= x^l \sum_{N=1}^{N_m} C_N x^N = x^{l+1} (C_1 + C_3 x^2 + C_5 x^4 + \dots + C_{N_m+1} x^{N_m}) = \\
&= x^{l+1} \sum_{k=0}^n C_{2k+1} x^{2k} = x^{l+1} P_n^{(-)}(x^2).
\end{aligned} \tag{11.113}$$

Здесь $N = 2k + 1$ ($k = 0, 1, 2, \dots, n$), однако под $N_m = 2n$ в соотношении (11.113) мы обозначили максимальную степень полинома перед x^{l+1} , которая является четной. Также

$$\frac{C_{N+2}}{C_N} = \frac{C_{2k+3}}{C_{2k+1}} = \frac{[2\beta_{01}(2k+1+l) - (W - \beta_{01})]}{[(2k+l+3)(2k+l+2) - l(l+1)]}. \tag{11.114}$$

Величина n есть максимальная степень x^2 в полиномах $P^{(+)}$ и $P^{(-)}$, входящих в (11.111) и (11.113), т. е. n – это число положительных нулей функции $G(x)$, не считая нуля в начале координат. Это число естественно назвать *радиальным квантовым числом* (аналогично числу n_r в случае кулоновского потенциала).

Итак, видим, что спектр стационарных состояний в потенциальной яме трехмерного изотропного осциллятора представляет собой эквидистантную (с расстоянием $\hbar\omega$) последовательность энергетических состояний. Каждое из состояний характеризуется двумя квантовыми числами – n и l . Энергия зависит только от комбинации этих квантовых чисел:

$$E_{nl} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) \equiv \hbar\omega \left(\Lambda + \frac{3}{2} \right), \tag{11.115}$$

где величина

$$\Lambda = 2n + l \tag{11.116}$$

называется *главным квантовым числом*. Это то же самое число, которое мы ранее обозначили как N в формуле (8.64). Каждое значение $\Lambda \geq 2$ может осуществляться несколькими комбинациями значений n и l , следовательно, энергетические уровни со значениями $\Lambda \geq 2$ являются вырожденными по l .

В общем случае для каждого уровня с главным квантовым числом Λ имеется $\Lambda/2$ состояний, отличающихся квантовыми числами n , с орбитальными моментами, равными $l = \Lambda - 2n$, каждое из которых вырождено $2l + 1$ раз по проекциям орбитального момента $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Поэтому общая кратность вырождения стационарного состояния с квантовым числом Λ будет

$$w_n = \sum_{n=0}^{\Lambda/2} (2\Lambda - 4n + 1) =$$

$$= (2\Lambda + 1) \left(\frac{\Lambda}{2} + 1 \right) - 2 \frac{\Lambda}{2} \left(\frac{\Lambda}{2} + 1 \right) = \frac{(\Lambda + 2)(\Lambda + 1)}{2}. \quad (11.117)$$

Выражение (11.117) в точности совпадает с соотношением (8.65), которое мы получили ранее в главе 8.

Четность стационарных состояний соответствует четности Λ . Волновая функция основного состояния с $\Lambda = 0$ ($N_m = 0, l = 0$) является четной и определяется одним членом суммы (11.113), содержащим C_0 . Этой суммой определяются четные состояния с четными $l = 0, 2, 4, \dots$. Низшее нечетное состояние с $\Lambda = 1$ ($N_m = 0, l = 1$) определяется одним членом суммы (11.114), содержащим C_1 . Эта сумма определяет все нечетные состояния изотропного осциллятора с $l = 1, 3, 5, \dots$

Для обозначения стационарных состояний в сферической осцилляторной яме также используются буквенные обозначения $s, p, d, \dots$, соответствующие значениям $l = 0, 1, 2, \dots$. Перед буквой ставится число $n + 1$, которое есть число нулей (узлов) радиальной волновой функции, включая и нуль в начале координат, или номер состояния с данным l в сторону увеличения энергии (табл. 11.1). Так, например, состоянию $1s$ соответствуют $n = l = 0$, состоянию $1p$ соответствуют $n = 0, l = 1$ и т. д.

В таблице 11.1 приведены значения энергии первых стационарных состояний сферического осциллятора, соответствующие квантовые числа и степени вырождения уровней. Заметим, что степень вырождения состояний изотропного осциллятора с главным квантовым числом Λ равна $(\Lambda + 1)(\Lambda + 2)/2$, а не n^2 , как это имеет место в случае водородного атома (см. равенство (11.90)), т. е. при больших главных квантовых числах в два раза меньше. Это различие объясняется тем, что в случае осциллятора угловой момент l может принимать либо только нечетные значения (если Λ нечетное), либо только четные (если Λ четное). Последнее обстоятельство вытекает из того, что соотношение (11.109) связывает C_N с C_{N+2} , а не с C_{N+1} , как в случае водородоподобного атома (см. уравнение (11.82)).

Таблица 11.1.

Энергии стационарных состояний и их степени вырождения для изотропного осциллятора (сферическая система координат)

E_Λ	Λ	$(n + 1)l$	w_Λ
$3/2\hbar\omega$	0	1s	1
$5/2\hbar\omega$	1	1p	3
$7/2\hbar\omega$	2	2s, 1d	6
$9/2\hbar\omega$	3	2p, 1f	10
$11/2\hbar\omega$	4	3s, 2d, 1g	15

Получим выражения для нескольких радиальных функций низших стационарных состояний изотропного осциллятора.

1s, $n = 0$, $l = 0$, $\Lambda = 0$.

Из равенства (11.111) имеем

$$R_{1s} = G_0^{(+)}(x) e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2} = C_0 x e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2} = A r e^{-\frac{1}{2}a^2 r^2}. \quad (11.118)$$

Коэффициент A находим из условия нормировки. Используя соотношение (8.15), имеем

$$\int_0^\infty R_{1s}^2 dr = \int_0^\infty A^2 r^2 e^{-\frac{r^2}{a^2}} dr = \frac{a^3}{2} \frac{A^2}{2} \sqrt{\pi} = 1. \quad (11.119)$$

Откуда

$$A = 2\pi^{-1/4} a^{-3/2}$$

и

$$\frac{R_{1s}(r)}{r} = 2\pi^{-1/4} \sqrt{\frac{1}{a^3}} e^{-\frac{1}{2}a^2 r^2} = 2\pi^{-1/4} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}. \quad (11.120)$$

Заметим, что выражение для радиальной волновой функции *основного* состояния трехмерного изотропного осциллятора R_{1s} формально совпадает с волновой функцией (8.28) первого *возбужденного* состояния линейного осциллятора с $n = 1$, которая содержит один узел в начале координат, как и радиальная функция основного состояния трехмерного осциллятора.

1p, $n = 0$, $l = 1$, $\Lambda = 1$.

Из уравнения (11.113) имеем

$$R_{1p} = G_1^{(-)}(x) e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2} = C_1 x^2 e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2} = B r^2 e^{-\frac{1}{2}a^2 r^2}. \quad (11.121)$$

Условие нормировки –

$$\int_0^{\infty} R_{1p}^2 dr = B^2 \int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{r^2}{a^2}} dr = B^2 \frac{3a^5}{8} \sqrt{\pi} = 1,$$

откуда

$$B = \pi^{-1/4} \sqrt{\frac{8}{3a^5}} = 2\pi^{-1/4} \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{5/4}$$

и

$$\frac{R_{1p}(r)}{r} = 2\pi^{-1/4} \sqrt{\frac{2}{3a^5}} r e^{-\frac{1}{2} \frac{r^2}{a^2}} = 2\pi^{-1/4} \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{5/4} r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}. \quad (11.122)$$

2s, n = 1, l = 0, Λ = 2.

Из равенства (11.111) получаем

$$R_{2s} = G_2^{(+)}(x) e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2} = (C_0x + C_2x^3) e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2}, \quad (11.123)$$

где из соотношения (11.109а) получаем

$$\frac{C_2}{C_0} = \frac{3\beta_{01} - W}{6} = \frac{1}{6} \left(\frac{3\hbar\omega}{2} - 2\hbar\omega - \frac{3\hbar\omega}{2} \right) = -\frac{\hbar\omega}{3}. \quad (11.124)$$

Таким образом, с учетом соотношений

$$x = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} r, \quad a = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2}$$

имеем

$$\begin{aligned} R_{2s} &= G_2^{(+)}(x) e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2} = C_0 \left(x - \frac{\hbar\omega}{3} x^3 \right) e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2} = \\ &= C_0 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \left(r - \frac{2}{3} \frac{m\omega}{\hbar} r^3 \right) e^{-\frac{r^2}{2a^2}} \equiv D r \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r^2}{a^2} \right) e^{-\frac{r^2}{2a^2}}. \end{aligned}$$

Константа D определяется из условия нормировки

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} R_{2s}^2 dr &= D^2 \int_0^{\infty} \left(r^2 - \frac{4}{3} \frac{r^4}{a^2} + \frac{4}{9} \frac{r^6}{a^4} \right) e^{-\frac{r^2}{a^2}} dr = \\ &= D^2 \sqrt{\pi} \left(\frac{a^3}{4} - \frac{4}{3} \frac{1}{a^2} \frac{3a^5}{8} + \frac{4}{9} \frac{1}{a^4} \frac{15a^7}{16} \right) = D^2 \sqrt{\pi} \frac{a^3}{6} = 1. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$D = \pi^{-1/4} \sqrt{\frac{6}{a^3}} = \pi^{-1/4} \sqrt{6} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4}$$

и

$$\begin{aligned}\frac{R_{2s}}{r} &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{6}{a^3}} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r^2}{a^2}\right) e^{-\frac{r^2}{2a^2}} = \\ &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{6} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{m\omega r^2}{\hbar}\right) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}.\end{aligned}\quad (11.125)$$

1d, $n = 0$, $l = 2$, $\Lambda = 2$.

Из равенства (11.111) имеем

$$R_{1d} = G_2^{(+)}(x) e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2} = C_0 x^3 e^{-\frac{1}{2}\beta_{01}x^2} \equiv F r^3 e^{-\frac{r^2}{2a^2}},$$

где, как и ранее, константа F определяется условием нормировки

$$\begin{aligned}\int_0^\infty R_{1d}^2 dr &= F^2 \int_0^\infty \left(\frac{4}{9} \frac{r^6}{a^4}\right) e^{-\frac{r^2}{a^2}} dr = \\ &= F^2 \sqrt{\pi} \frac{15a^7}{16} = 1.\end{aligned}$$

Так что

$$F = 4\pi^{-1/4} \sqrt{\frac{1}{15a^7}} = \frac{4\pi^{-1/4}}{\sqrt{15}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{7/4},$$

и в результате

$$\frac{R_{1d}}{r} = 4\pi^{-1/4} \sqrt{\frac{1}{15a^7}} r^2 e^{-\frac{r^2}{2a^2}} = \frac{4\pi^{-1/4}}{\sqrt{15}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{7/4} r^2 e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}. \quad (11.126)$$

При вычислении нормировочных констант использовались табличные интегралы от произведений гауссовой функции на степенные (см. например, работу [46]). Способы их вычисления мы обсуждали в главе 6 (см. соотношение (6.81)) и главе 8 (см. раздел 8.1).

Глава 12. Приближенные методы квантовой механики. Теория возмущений

12.1. Теория возмущений в стационарных состояниях с дискретным спектром

Предположим, что оператор Гамильтона квантовой системы можно разбить на два слагаемых:

$$H = H_0 + V,$$

из которых H_0 представляет гамильтониан идеализированной задачи, которая допускает точное решение, а V – некоторая малая добавка, которую принято называть *оператором возмущения*. Оператором возмущения может быть часть оператора Гамильтона, которая не учитывалась в идеализированной задаче, или потенциальная энергия внешнего воздействия (поля).

В теории возмущений мы ищем формулы, выражающие энергию и волновые функции системы с возмущением через известные энергии, и волновые функции невозмущенной системы, описываемой гамильтонианом H_0 . Сначала предположим, что в невозмущенной задаче отсутствует вырождение, т. е. каждой энергии соответствует только одно состояние

$$H_0 \varphi_n = E_n^0 \varphi_n, \quad (12.1)$$

и пусть

$$V = \lambda W, \quad (12.2)$$

где λ – малый безразмерный параметр. Тогда задача отыскания собственных функций и собственных значений оператора H сводится к решению уравнения

$$(H_0 + \lambda W) \psi = E \psi. \quad (12.3)$$

Перейдем от координатного представления к энергетическому, выбрав в качестве базисной систему собственных функций φ_n оператора H_0 . Итак,

$$\psi = \sum_n a_n \varphi_n, \quad (12.4)$$

тогда

$$\sum_n a_n E_n^0 \varphi_n + \sum_n a_n \lambda W \varphi_n = \sum_n a_n E \varphi_n. \quad (12.5)$$

Умножая слева скалярно на $\langle \varphi_m |$ и используя ортонормированность $\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn}$, получаем бесконечную систему алгебраических уравнений для амплитуд a_n

$$(E - E_m^0) a_m = \lambda \sum_n \langle \varphi_m | W | \varphi_n \rangle a_n \equiv \lambda \sum_n W_{mn} a_n. \quad (12.6)$$

Здесь мы обозначили через W_{mn} матричные элементы оператора возмущения W .

Для определения поправок к энергии и волновой функции стационарного состояния с квантовым числом l положим

$$E = E_l^0 + \lambda E_l^{(1)} + \lambda^2 E_l^{(2)} + \dots, \quad (12.7)$$

$$a_m = \delta_{ml} + \lambda a_m^{(1)} + \lambda^2 a_m^{(2)} + \dots \quad (12.8)$$

Подставляя эти ряды в систему уравнений (12.6), находим

$$\begin{aligned} & \left[E_l^0 - E_m^0 + \lambda E_l^{(1)} + \lambda^2 E_l^{(2)} + \dots \right] \left[\delta_{ml} + \lambda a_m^{(1)} + \lambda^2 a_m^{(2)} + \dots \right] = \\ & = \lambda \sum_n W_{mn} \left[\delta_{nl} + \lambda a_n^{(1)} + \lambda^2 a_n^{(2)} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (12.9)$$

Полагая $m = l$ и приравнивая члены, стоящие у одинаковых степеней λ , получаем совокупность уравнений

$$\begin{aligned} E_l^{(1)} &= W_{ll}, \\ E_l^{(2)} + E_l^{(1)} a_l^{(1)} &= \sum_n W_{ln} a_n^{(1)} \end{aligned} \quad (12.10)$$

и т. д.

Полагая $m \neq l$, находим аналогичным образом

$$\begin{aligned} (E_l^0 - E_m^0) a_m^{(1)} &= W_{ml}, \\ E_l^{(1)} a_m^{(1)} + (E_l^0 - E_m^0) a_m^{(2)} &= \sum_n W_{mn} a_n^{(1)} \end{aligned} \quad (12.11)$$

и т. д.

Таким образом, в первом приближении энергия системы выражается формулой

$$E_l = E_l^0 + \lambda E_l^{(1)} = E_l^0 + \lambda W_{ll} = E_l^0 + V_{ll} = E_l^0 + \langle \phi_l | V | \phi_l \rangle, \quad (12.12)$$

т. е. поправка к энергии в первом приближении равна среднему значению оператора возмущения V в состоянии ϕ_l нулевого приближения.

Волновая функция состояния l в первом приближении будет

$$\psi_l = \phi_l + \lambda a_l^{(1)} \phi_l + \sum_{n \neq l} \frac{V_{ln}}{E_l^0 - E_n^0} \phi_n. \quad (12.13)$$

Величина $\lambda a_l^{(1)}$ определяется из условия нормировки функции ψ_l . Поскольку функции ϕ_l нормированы, то из условия нормировки с точностью до λ^2 следует равенство $a_l^{(1)} = -a_l^{(1)*}$. Следовательно, величина $a_l^{(1)} = i |a_l^{(1)}|$ чисто мнимая, т. е. в выражении (12.13) множитель перед ϕ_l имеет вид

$$1 + i |a_l^{(1)}| \lambda \approx e^{i |a_l^{(1)}| \lambda},$$

а так как волновые функции определяются с точностью до фазового множителя, то можно положить $a_l^{(1)} = 0$. Итак, в первом приближении функция определяется равенством

$$\psi_l = \varphi_l + \sum_{n \neq l} \frac{V_{ln}}{E_l^0 - E_n^0} \varphi_n. \quad (12.14)$$

Далее находим поправку к энергии во втором приближении:

$$E_l^{(2)} = \sum_{n \neq l} \frac{V_{ln} V_{nl}}{E_l^0 - E_n^0} \varphi_n = \sum_{n \neq l} \frac{|V_{ln}|^2}{E_l^0 - E_n^0} \varphi_n. \quad (12.15)$$

Таким образом, энергия во втором приближении выражается формулой

$$E_l = E_l^{(0)} + V_{ll} + \sum_{n \neq l} \frac{|V_{ln}|^2}{E_l^0 - E_n^0} \varphi_n. \quad (12.16a)$$

Из равенства (12.16a) следует, что поправка второго порядка к уровню энергии основного состояния (т. е. когда $E_l^0 < E_n^0$) всегда отрицательна. Необходимым условием применимости теории возмущений является малость каждой последующей поправки по сравнению с предыдущей. Таким образом, условие применимости теории возмущений можно записать в виде

$$|H_{ln}| = |V_{ln}| \ll |E_l^0 - E_n^0|. \quad (12.16б)$$

12.2. Теория возмущений при наличии двух близких уровней

Из наших формул следует, что если среди собственных значений оператора H_0 есть одно или несколько с энергией, близкой к E_l^0 , то поправки к волновым функциям и энергии уровня l будут велики (малые знаменатели), и пользоваться этими формулами нельзя. Задачу для этих уровней желательно решать точно.

Покажем это на примере двух близких уровней. Пусть оператор H_0 имеет два близких собственных значения E_1^0 и E_2^0 , которым соответствуют собственные функции φ_1 и φ_2 , а все остальные собственные значения расположены далеко от них. При вычислении поправки, например, к волновой функции φ_1 видим, что из-за малого знаменателя примесь к ней φ_2 может быть велика, поэтому ищем решение в виде

$$\psi = a_1 \varphi_1 + a_2 \varphi_2. \quad (12.17)$$

Подставляя в уравнение Шредингера

$$(H - E)\psi = 0,$$

где $H = H_0 + V$, получим

$$a_1 (H - E) \varphi_1 + a_2 (H - E) \varphi_2 = 0. \quad (12.18)$$

Умножая равенство (12.18) скалярно слева поочередно на φ_1 и φ_2 , получаем систему двух линейных однородных уравнений

$$\begin{aligned}(H_{11} - E)a_1 + H_{12}a_2 &= 0, \\ H_{21}a_1 + (H_{22} - E)a_2 &= 0,\end{aligned}\tag{12.19}$$

где

$$H_{11} = E_1^0 + V_{11}, H_{22} = E_2^0 + V_{22}, \quad H_{12} = V_{12}, H_{21} = V_{21} = V_{12}^*.\tag{12.20}$$

Условие разрешимости этой системы (секулярное уравнение, вытекающее из равенства нулю определителя) имеет вид

$$(H_{11} - E)(H_{22} - E) - H_{12}H_{21} = 0\tag{12.21a}$$

или

$$E^2 - E(H_{11} + H_{22}) + H_{11}H_{22} - |H_{12}|^2 = 0.\tag{12.21б}$$

Оно определяет два значения энергии:

$$E_{1,2} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + |H_{12}|^2}.\tag{12.22}$$

Знак «плюс» относится к уровню E_1 , а знак «минус» — к уровню E_2 . Если выполняется условие применимости обычной теории возмущений (12.16), т. е. если

$$|H_{12}| = |V_{12}| \ll |H_{11} - H_{22}|,$$

то, раскладывая равенство (12.22) в ряд по малому отношению $|H_{12}|/(H_{11} - H_{22})$, получим

$$E_1 = H_{11} + \frac{|H_{12}|^2}{H_{11} - H_{22}} = E_1^0 + V_{11} + \frac{|V_{12}|^2}{E_1^0 + V_{11} - (E_2^0 + V_{22})},\tag{12.23}$$

$$E_2 = H_{22} + \frac{|H_{12}|^2}{H_{22} - H_{11}} = E_2^0 + V_{22} + \frac{|V_{12}|^2}{E_2^0 + V_{22} - (E_1^0 + V_{11})}.\tag{12.24}$$

Эти выражения дают энергии, совпадающие с полученными, см. равенства (12.16а), по теории возмущений.

Если же выполняется неравенство

$$|H_{12}| = |V_{12}| \gg |H_{11} - H_{22}|,\tag{12.25}$$

то

$$E_{1,2} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \left[|H_{12}| + \frac{(H_{11} - H_{22})^2}{8|H_{12}|} \right].\tag{12.26}$$

На рисунке 12.1 показаны энергии E_1 и E_2 как функции разности $\Delta = (H_{11} - H_{22})/2$ для некоторого фиксированного значения H_{12} . Пунктирными линиями указаны H_{11} и H_{22} . Интересно отметить, что поправки к значениям H_{11} и H_{22} , обусловленные взаимодействием V_{12} , всегда увеличивают расстояние между уровнями. В связи с этим иногда говорят об отталкивании уровней.

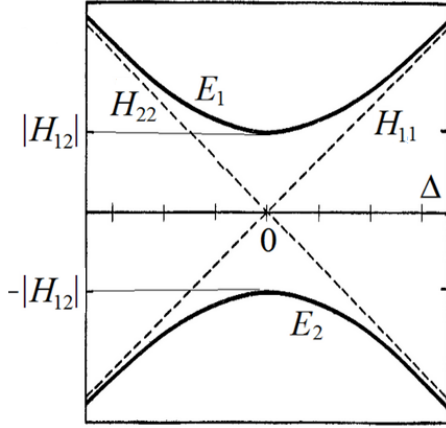


Рис. 12.1. Уровни энергии E_1 и E_2 в зависимости от разности энергий $\Delta = (H_{11} - H_{22})/2$ невозмущенной системы. Значения $H_{11} = \Delta$ и $H_{22} = -\Delta$ указаны пунктирными линиями

Два значения энергии (12.22) удобно переписать, используя параметр

$$\Delta = \frac{H_{11} - H_{22}}{2}. \quad (12.27)$$

Тогда

$$E_{1,2} - H_{11} = -\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 + |H_{12}|^2}. \quad (12.28)$$

Из первого уравнения (12.19) для амплитуд a_1 и a_2 , определяющих волновую функцию, следует

$$(H_{11} - E)a_1 + H_{12}a_2 = 0 \quad \text{и} \quad \frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E - H_{11}}.$$

Подставляя равенство (12.28), имеем

$$\frac{a_1^{(1,2)}}{a_2^{(1,2)}} = \frac{V_{12}}{-\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 + |V_{12}|^2}} \equiv \frac{\operatorname{tg} 2\gamma}{-1 \pm \sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 2\gamma}} = \frac{\sin 2\gamma}{-\cos 2\gamma \pm 1}, \quad (12.29)$$

где мы ввели величину $\operatorname{tg} 2\gamma \equiv V_{12}/\Delta$. В результате имеем

$$\frac{a_1^{(1)}}{a_2^{(1)}} = \frac{\sin 2\gamma}{-\cos 2\gamma + 1} = \frac{\cos \gamma}{\sin \gamma}, \quad \frac{a_1^{(2)}}{a_2^{(2)}} = \frac{\sin 2\gamma}{-\cos 2\gamma - 1} = -\frac{\sin \gamma}{\cos \gamma},$$

так что нормированные волновые функции состояний, соответствующих энергиям E_1 и E_2 , будут иметь вид

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \varphi_1 \cos \gamma + \varphi_2 \sin \gamma, \\ \psi_2 &= -\varphi_1 \sin \gamma + \varphi_2 \cos \gamma. \end{aligned} \quad (12.30)$$

Если $V_{12}/\Delta = \operatorname{tg} 2\gamma \ll 1$, то $\operatorname{tg} 2\gamma \approx 2\gamma \approx V_{12}/\Delta \ll 1$, и мы имеем результат

$$\psi_1 \approx \varphi_1 + \frac{V_{12}}{2\Delta} \varphi_2, \quad \psi_2 \approx \varphi_2 + \frac{V_{12}}{-2\Delta} \varphi_1, \quad (12.31)$$

даваемый теорией возмущений. Если же разность энергий уровней стремится к нулю (т. е. имеет место вырождение уровней), $\Delta/V_{12} \ll 1$, то

$$\operatorname{tg} 2\gamma = V_{12}/\Delta \rightarrow \infty, \quad \gamma \rightarrow \pi/4.$$

В результате

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2), \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_2 - \varphi_1), \quad (12.32)$$

т. е. уровни полностью перемешиваются (образуя симметричную и антисимметричную комбинации невозмущенных функций) и расталкиваются:

$$E_{1,2} = E_0 \pm |V_{12}|, \quad (12.33)$$

где $H_{11} \approx H_{22} = E_0$.

12.3. Нестационарная теория возмущений

Рассмотрим задачу, в которой возмущение V зависит от времени, т. е.

$$H = H_0 + V(t), \quad (12.34)$$

а стационарные состояния невозмущенного гамильтониана H_0 известны:

$$H_0 \varphi_n = E_n \varphi_n. \quad (12.35)$$

В этом случае H зависит от времени, так что энергия не сохраняется, и говорить о поправках к энергиям стационарных состояний не приходится. Стационарных состояний не существует. Поэтому необходимо решать нестационарное уравнение Шредингера, содержащее производную по времени:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [H_0 + V(t)]\psi. \quad (12.36)$$

Будем искать решение ψ в виде разложения по собственным функциям невозмущенного волнового уравнения, зависящего от времени. Очевидно, коэффициенты разложения также будут зависеть от времени:

$$\psi = \sum_n a_n(t) \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (12.37)$$

Подставляя соотношение (12.37) в уравнение (12.36), получаем

$$\sum_n i\hbar \dot{a}_n \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} + \sum_n a_n E_n \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = \sum_n a_n (E_n + V) \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}.$$

Умножив обе части слева на ϕ_k^* , проинтегрируем по всему пространству, тогда, используя ортонормированность функций ϕ_k , получим систему уравнений

$$i\hbar \dot{a}_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} = \sum_n a_n V_{kn} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

или

$$\dot{a}_k = \frac{1}{i\hbar} \sum_n V_{kn} a_n e^{-i\omega_{kn}t}, \quad (12.38)$$

где

$$\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar} \quad (12.39)$$

частота перехода между уровнями с энергиями E_k и E_n .

Бесконечная система уравнений (12.38) для всех значений k полностью эквивалентна исходному уравнению Шредингера. Вместо функции ψ роль неизвестной функции теперь играет совокупность коэффициентов a_n . В связи с выбором представления, определяемого зависящими от времени собственными функциями невозмущенного гамильтониана, сам оператор H_0 не входит в уравнение (12.38). Это уравнение отвечает представлению взаимодействия.

Аппроксимация теории возмущений состоит в замене V на λW и последующем разложении a_n в ряд по степеням λ (в конечном результате мы положим $\lambda = 1$):

$$a_n = a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \lambda^2 a_n^{(2)} + \dots \quad (12.40)$$

В результате подстановки в уравнение (12.38)

$$\dot{a}_k^{(0)} + \lambda \dot{a}_k^{(1)} + \lambda^2 \dot{a}_k^{(2)} + \dots = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \lambda W_{kn} \left(a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \lambda^2 a_n^{(2)} + \dots \right)$$

получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} \dot{a}_k^{(0)} &= 0, \\ \dot{a}_k^{(1)} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_n W_{kn} a_n^{(0)} e^{i\omega_{kn}t}, \\ \dot{a}_k^{(s+1)} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_n W_{kn} a_n^{(s)} e^{i\omega_{kn}t}. \end{aligned} \quad (12.41)$$

В принципе, их можно последовательно проинтегрировать и получить решения с любой заданной степенью точности.

12.3.1. Первый порядок теории возмущений

Первое из уравнений (12.41) показывает, что коэффициенты нулевого порядка не зависят от времени. Их значения представляют собой начальные условия задачи; они характеризуют состояние системы до того, как на нее было «включено» возмущение. Допустим, что лишь один из коэффициентов $a_k^{(0)}$ не равен нулю. Это означает, что до начала действия возмущения система находилась в состоянии с определенной (невозмущенной) энергией. Результаты, которые мы получим, легко обобщаются на случай, когда не один, а несколько коэффициентов нулевого порядка отличны от нуля.

Итак, положим

$$a_k^{(0)} = \delta_{km}. \quad (12.42)$$

Тогда, интегрируя уравнение первого порядка

$$\dot{a}_k^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} W_{km} e^{i\omega_{km}t}$$

и полагая $\lambda = 1$, имеем

$$a_k^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t V_{km}(t') e^{i\omega_{km}t'} dt'. \quad (12.43)$$

Постоянная интегрирования равна нулю, чтобы коэффициент $a_k = 0$ при $t = -\infty$. Заметим, что амплитуда состояния φ_k ($k \neq m$), т. е. амплитуда перехода $m \rightarrow k$ пропорциональна компоненте Фурье зависящего от времени матричного элемента $V_{km}(t)$, связывающего данное состояние с начальным, причем угловая частота определяется разностью энергий начального и конечного состояний.

Формула принимает особенно простой вид, если $V(t)$ в промежутке между моментами включения 0 и выключения t имеет постоянное значение. Тогда для амплитуды первого порядка в момент t имеем

$$a_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{km} e^{i\omega_{km}t'} dt' = -\frac{V_{km}(e^{i\omega_{km}t} - 1)}{\hbar\omega_{km}} = -\frac{2iV_{km}}{\hbar\omega_{km}} e^{i\frac{\omega_{km}}{2}t} \sin\left(\frac{\omega_{km}}{2}t\right). \quad (12.44)$$

Это выражение остается справедливым и во все последующие моменты времени.

Таким образом, вероятность того, что в момент времени t система будет находиться в состоянии k ,

$$|a_k^{(1)}(t)|^2 = \frac{4|V_{km}|^2}{\hbar^2\omega_{km}^2} \sin^2\left(\frac{\omega_{km}}{2}t\right) \equiv \frac{4|V_{km}|^2}{\hbar^2} D(\omega_{km}, t), \quad (12.45)$$

где

$$D(\omega_{km}, t) = \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{km} t}{2}\right)}{\omega_{km}^2}. \quad (12.46)$$

Функция (12.46) изображена на рис. 12.2. Площадь, ограниченная кривой, пропорциональна t . Поэтому если имеются несколько состояний k с энергией E_k , почти равной E_m , а величины V_{km} почти не зависят от k , то вероятность нахождения системы в одном из этих состояний будет пропорциональна t . Этот результат представляет физический интерес, так как в конечном счете нам нужно вычислить вероятность перехода w , отнесенную к единице времени, а для этого необходимо, чтобы полная вероятность перехода за время действия возмущения была пропорциональна времени. Отсюда следует, что w имеет определенное значение лишь в том случае, если конечное состояние k принадлежит непрерывной или почти непрерывной группе состояний (чтобы вся кривая на рис. 12.2 была заполнена).

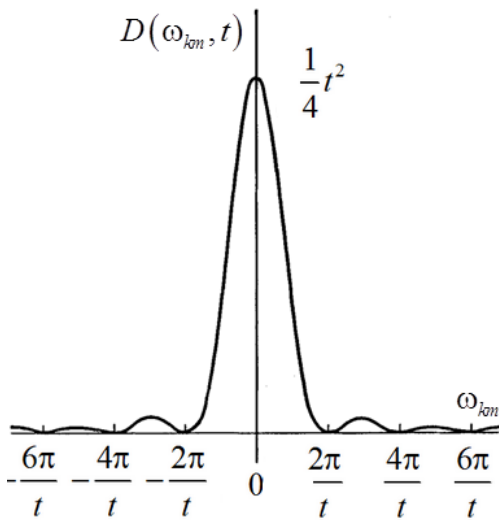


Рис. 12.2. Изображена зависимость от частоты ω_{km} функции $D(\omega_{km}, t) = \sin^2(\omega_{km} t / 2) / \omega_{km}^2$. Площадь под кривой приблизительно равна площади треугольника с высотой $t^2/4$ и основанием $4\pi/t$, т. е. $\pi t/2$

Разброс энергии конечных состояний $E_k = E_m + \hbar\omega_{km}$, показанный на рис. 12.2, связан с соотношением неопределенности между энергией и временем. В самом деле, включение возмущения V можно рассматривать как способ измерения энергии системы путем перевода ее в одно из состояний k (в силу наличия возмущения эта энергия необязательно совпадает с начальной). Необходимое для измерения время равно t , так что неопределенность в энергии есть $\sim 2\pi\hbar/t$. Это находится в соответствии с шириной главного пика на рис. 12.2. Отметим, что закон сохранения энергии при переходе (дополненный принципом неопределенности) выполняется автоматически.

12.3.2. Вероятность перехода. Золотое правило Ферми

Предположим, что система находится в большом кубе с ребром L . Тогда собственные функции будут принадлежать дискретному спектру и могут быть нормированы на единицу.

Рассмотрим теперь некоторую группу конечных состояний k , энергия которых почти не отличается от начальной, и допустим, что элементы матрицы возмущения V_{km} слабо зависят от k . Определим плотность конечных состояний $\rho(k)$ таким образом, что величина

$$\rho(k) dE_k \equiv dN = \frac{dN}{dE_k} dE_k \quad (12.47)$$

представляет собой число состояний с энергией в интервале dE_k , и будем считать, что $\rho(k)$ также является медленно меняющейся функцией k .

Вероятность перехода в состояния данной группы, отнесенную к единице времени, можно записать в виде

$$w = t^{-1} \sum_k \left| a_k^{(1)}(t) \right|^2 = t^{-1} \int \left| a_k^{(1)}(t) \right|^2 \rho(k) dE_k. \quad (12.48)$$

Ребра куба предполагаются настолько большим, что суммирование по k можно заменить интегрированием по dE_k . Так как наибольший вклад в интеграл вносят уровни, лежащие вблизи точки $E_k = E_m + \hbar\omega_{km}$, а функции V_{km} и $\rho(k)$ изменяются медленно, то их можно вынести за знак интеграла и переписать соотношение (12.48) в виде

$$w = \frac{1}{t} \cdot \frac{4|V_{km}|^2}{\hbar} \rho(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\omega_{km} t / 2)}{\omega_{km}^2} d\omega_{km}. \quad (12.49)$$

Здесь индекс k характеризует типичное состояние из группы конечных состояний, энергия которых близка к E_k .

Как мы видели из рис. 12.2, площадь под кривой $D(\omega_{km}, t)$ равна $\pi t/2$. Прямое вычисление интеграла в уравнении (12.49) с использованием табличной формулы

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^{-2} \sin^2 x = \pi \quad (12.50)$$

дает в точности тот же результат, так что окончательно имеем

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{km}|^2 \rho(k). \quad (12.51)$$

Эта формула носит название *золотого правила Ферми* для вероятности перехода в единицу времени, или скорости перехода.

12.4. Эффективное сечение рассеяния

Применим золотое правило Ферми к случаю, когда начальное и конечное состояния являются плоскими волнами, т. е. описывают свободную частицу, а роль возмущения играет потенциальная энергия $V(\mathbf{r})$. Такой случай реализуется при рассеянии частицы на силовом центре (или при рассеянии частицы на другой частице-мишени в с. ц. м.). Итак, свободная частица налетает на силовой центр, взаимодействует, в результате чего может измениться ее импульс, и улетает в свободном состоянии. Поскольку потенциал не зависит от времени, энергия частицы измениться не может.

Волновые функции начального и конечного состояний запишем в виде

$$\varphi_a(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{ik_0 \mathbf{r}}, \quad \varphi_b(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{ik \mathbf{r}}, \quad (12.52)$$

где k_0 и k – волновые векторы в начальном и конечном состояниях соответственно. В связи с этим элементы матрицы возмущений имеют вид

$$V_{ba} = \frac{1}{L^3} \int e^{-ik \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{ik_0 \mathbf{r}} d^3 r = \frac{1}{L^3} \int e^{-i\mathbf{q} \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3 r = \frac{1}{L^3} V(\mathbf{q}), \quad (12.53)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ – переданный частице импульс, или просто переданный импульс. Заметим, что на самом деле переданный импульс есть $\hbar \mathbf{q}$, но мы будем так называть и просто $\mathbf{q}$.

Для вычисления плотности конечных состояний вспомним, что допустимые значения $\mathbf{k}$ в кубе со стороной L имеют вид $k_x = 2\pi n_x/L$, $k_y = 2\pi n_y/L$, $k_z = 2\pi n_z/L$, где n_x, n_y, n_z – целые числа. Если компоненты k_x, k_y, k_z волнового вектора $\mathbf{k}$ лежат в интервалах $(k_x, k_x + dk_x)$, $(k_y, k_y + dk_y)$, $(k_z, k_z + dk_z)$, то число состояний равно

$$dn \equiv dn_x dn_y dn_z = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 dk_x dk_y dk_z = \frac{d^3 k \cdot L^3}{(2\pi)^3} \equiv \frac{d^3 p \cdot L^3}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (12.54)$$

Оно есть не что иное, как число состояний в элементе фазового объема $d^3 p L^3$, причем величина $(2\pi\hbar)^3$ представляет собой минимальный объем ячейки в фазовом пространстве, что вполне согласуется с принципом неопределенности.

Для данной энергии имеется много различных конечных состояний $\mathbf{k}$, соответствующих различным направлениям этого вектора при заданной энергии. Все эти состояния лежат на сфере в импульсном пространстве: $\mathbf{p}^2 = \text{const} = 2mE$.

Элемент объема $d^3 p$ в импульсном пространстве в сферических координатах имеет вид

$$d^3 p = p^2 dp \sin \theta d\theta d\varphi \equiv p^2 dp d\Omega, \quad (12.55)$$

где $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ – элемент телесного угла вблизи направления, задаваемого полярным и азимутальным углами θ и φ , полярный угол θ обычно отсчитывается от направления $\mathbf{k}_0$. Таким образом,

$$dn = \rho dE_k = \frac{d^3 p \cdot L^3}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p^2 dp \cdot d\Omega L^3}{(2\pi\hbar)^3} \equiv \frac{d\Omega L^3 p^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp}{dE_k} dE_k. \quad (12.56)$$

Поскольку $pdp = m dE$, то

$$\rho = \frac{L^3 p^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp}{dE_k} d\Omega = \frac{L^3 p m}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega = \frac{L^3 m \hbar k}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega_k \quad (12.57)$$

и

$$dw = \frac{mk}{4\pi^2 \hbar^3 L^3} |V(\mathbf{q})|^2 d\Omega. \quad (12.58)$$

Полученное таким образом значение w представляет собой число dN рассеянных за единицу времени в элемент телесного угла $d\Omega$ частиц, отнесенное к полному числу N частиц, налетающих в единицу времени на мишень. Эту величину можно записать и так:

$$dw \equiv j_a d\sigma, \quad (12.59)$$

где j_m – величина плотности потока частиц, падающих на мишень (т. е. число частиц, пролетающих через единичную площадку в единицу времени), а $d\sigma$ – дифференциальное сечение рассеяния частицы-рассеивателя, имеющее смысл площадки, расположенной перпендикулярно пучку, которая рассеивает с единичной вероятностью в заданный интервал телесных углов $d\Omega$ (в классической механике это площадь поперечного сечения рассеивателя).

Условие того, что в объеме L^3 находится одна падающая частица с импульсом $\mathbf{p}$, означает, что падающий поток равен

$$j_a = \rho v = \frac{\hbar k_0}{m L^3},$$

так что из уравнений (12.58, 12.59) имеем

$$d\sigma = \frac{dw}{j_m} = \frac{m^2 k L^3}{4\pi^2 \hbar^3 L^3 \hbar k_0} |V(\mathbf{q})|^2 d\Omega = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{k}{k_0} |V(\mathbf{q})|^2 d\Omega. \quad (12.60)$$

Здесь k – волновой вектор рассеянной волны (возник из плотности конечных состояний); k_0 – волновой вектор падающей волны (появился из плотности падающего потока). При упругом рассеянии $k = k_0$.

В качестве единицы измерения сечений в ядерной физике обычно используется барн (русское обозначение – б или бн; международное – b). Величина 1 барн равна по порядку величины площади поперечного сечения ядра средней массы: $1 \text{ б} = 10^{-24} \text{ см}^2 \sim \pi R_N^2$.

Величина

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{k}{k_0} |V(\mathbf{q})|^2 \equiv \frac{k}{k_0} |A(\mathbf{q})|^2 \quad (12.61)$$

называется *дифференциальным сечением рассеяния* (это сечение рассеяния в единичный телесный угол). Здесь введена еще одна важная величина $A(\mathbf{q})$ с размерностью длины, она называется *амплитудой рассеяния*:

$$A(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3r \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}_0 \rangle. \quad (12.62)$$

Величина $A(\mathbf{q})$ является амплитудой рассеянной сферической волны (но это выходит за рамки нашего курса), знак «минус» возникает при точном вычислении этой амплитуды. Как и любая другая общая фаза, он никак не влияет на дальнейшие рассуждения.

Заметим, что нормировочный объем в конечный результат соотношения (12.60) не вошел, поэтому его обычно принимают равным единице, как это сделано в выражении (12.62).

При рассеянии на совокупности силовых центров потенциальная энергия будет иметь вид

$$V(\mathbf{r}) = \sum_a V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a),$$

и здесь будут важны относительные фазы амплитуд рассеяния на разных центрах, поскольку эти амплитуды складываются и могут интерферировать, при этом

$$A = \sum_a A_a(\mathbf{q}), \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k}{k_0} \left| \sum_a A_a(\mathbf{q}) \right|^2 \neq \frac{k}{k_0} \sum_a |A_a(\mathbf{q})|^2.$$

12.5. Рассеяние на сферически симметричном потенциальном барьере прямоугольной формы

Для иллюстрации рассмотрим рассеяние на потенциале, имеющем вид $V = V_0$ при $0 \leq r \leq R$ и $V = 0$ при $r > R$. Такая ситуация реализуется, например, при рассеянии нейтронов на наночастицах вещества, имеющих шарообразную форму. Амплитуда рассеяния (12.62) в этом случае будет

$$\begin{aligned} A(\mathbf{q}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(r) d^3r = \frac{2\pi m}{2\pi\hbar^2} \int_0^R dr \int_1^{-1} d \cos \theta r^2 e^{-iqr \cos \theta} V_0 = \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{q} \int_0^R r dr \sin qr = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{q^3} \int_0^{qR} x dx \sin x = \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{q^3} (\sin qR - qR \cos qR), \end{aligned} \quad (12.63)$$

где величина переданного импульса определяется из

$$q^2 = \mathbf{q}^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|^2 = k^2 + k_0^2 - 2kk_0 \cos \theta_0.$$

Здесь θ_0 – угол между начальным и конечным направлениями импульса рассеиваемой частицы – угол рассеяния. При упругом рассеянии $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$, так что

$$q^2 = 2k_0^2 (1 - \cos \theta_0) = 4k_0^2 \sin^2 \frac{\theta_0}{2} \quad \text{и} \quad q = 2k_0 \sin \frac{\theta_0}{2}. \quad (12.64)$$

При малых энергиях налетающей частицы $k_0 R \ll 1$, или (что то же самое) когда длина волны частицы много больше размера рассеивателя: $\lambda \gg R_0$. Раскладывая равенство (12.63) в ряд по степеням qR , получаем

$$\begin{aligned} A(\theta) &= -\frac{2m V_0}{\hbar^2} \frac{1}{q^3} \left(qR - \frac{q^3 R^3}{6} + \frac{q^5 R^5}{5!} - qR + \frac{q^3 R^3}{2} - \frac{q^5 R^5}{4!} \right) = \\ &= -\frac{2m V_0 R^3}{\hbar^2} \left(\frac{1}{3} - \frac{4q^2 R^2}{5!} \right) = -\frac{2m V_0 R^3}{3\hbar^2} \left(1 - \frac{2}{5} k_0^2 R^2 \sin^2 \frac{\theta_0}{2} \right). \end{aligned} \quad (12.65)$$

Из соотношения (12.65) следует, что при малых энергиях рассеяние изотропно. Угловая анизотропия рассеянных частиц (например, нейтронов) появляется только при $\lambda \sim R$. Поэтому, измеряя угловые распределения рассеянных нейтронов (например, наночастицами или биологическими объектами) при разных энергиях, по энергии, при которой появляется угловая анизотропия рассеяния, можно с хорошей точностью судить о размерах рассеивателей.

Заметим, что изотропия рассеяния (независимость амплитуды и сечения от угла рассеяния) при $\lambda \gg R$ имеет место не только в теории возмущений. Это общее свойство рассеяния медленных частиц, и связано оно с тем, что при $\lambda \gg R_0$ участвовать в рассеянии (т. е. взаимодействовать с потенциалом) может лишь частица в s -состоянии с $l = 0$, состояния с $l \neq 0$ соответствуют прохождению частицы с прицельными параметрами (см. рис. 11.1) $b_l = \lambda \sqrt{l(l+1)} > R$, на которых частица проходит вне зоны действия сил, так что в результате рассеяния у частицы может измениться только s -волновая компонента волновой функции. Это изменение и определяет рассеянную волну, соответственно, рассеяние будет изотропно по направлениям.

12.6. Еще раз о задаче двух тел. Разделение переменных в относительных координатах

Как мы уже отметили, во многих задачах, таких, например, как задача об атоме водорода или задача о рассеянии нейтрона ядром атома, потенциал является функцией относительного расстояния $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ между электроном и протоном или между нейтроном и ядром. Тем не менее, как и в классической теории, общее уравнение можно разделить на два, одно из которых будет зависеть только от расстояния $\mathbf{r} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, а другое – только от координат $\mathbf{R}$ центра масс. Чтобы показать это, запишем гамильтониан для двух частиц следующим образом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (12.66)$$

где

$$\hat{\mathbf{p}}_1 = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_1} \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_1}, \quad \hat{\mathbf{p}}_2 = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_2} \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_2}, \quad (12.67)$$

$\nabla_{\mathbf{r}_1}, \nabla_{\mathbf{r}_2}$ – градиенты по направлениям $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ соответственно. Введем новые координаты

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M}, \quad (12.68)$$

где $\mathbf{r}$ – расстояние между частицами; $\mathbf{R}$ – координата их центра масс; M – суммарная масса частиц. Соответствующие этим координатам операторы импульсов имеют вид

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}, \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}}. \quad (12.69)$$

Учитывая соотношения

$$\frac{\partial}{\partial x_{1,2}} = \frac{\partial\mathbf{r}}{\partial x_{1,2}} \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\partial\mathbf{R}}{\partial x_{1,2}} \nabla_{\mathbf{R}}, \quad \mathbf{r}_{1,2} = (x_{1,2}, y_{1,2}, z_{1,2}), \quad \mathbf{R} = (X, Y, Z), \quad \mathbf{r} = (x, y, z)$$

и

$$\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial x_{1,2}} \nabla_{\mathbf{r}} = \pm \nabla_x, \quad \frac{\partial\mathbf{R}}{\partial x_{1,2}} \nabla_{\mathbf{R}} = \frac{m_{1,2}}{M} \nabla_X,$$

имеем

$$\nabla_{\mathbf{r}_{1,2}} = \pm \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{m_{1,2}}{M} \nabla_{\mathbf{R}}. \quad (12.70)$$

В результате

$$\begin{aligned} \frac{\nabla_{\mathbf{r}_1}^2}{2m_1} + \frac{\nabla_{\mathbf{r}_2}^2}{2m_2} &= \frac{1}{2m_1} \left(\nabla_{\mathbf{r}} + \frac{m_1}{M} \nabla_{\mathbf{R}} \right)^2 + \frac{1}{2m_2} \left(-\nabla_{\mathbf{r}} + \frac{m_2}{M} \nabla_{\mathbf{R}} \right)^2 = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \left(\frac{1}{2m_1} \frac{m_1^2}{M^2} + \frac{1}{2m_2} \frac{m_2^2}{M^2} \right) \nabla_{\mathbf{R}}^2 = \\ &= \frac{1}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \frac{1}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2, \end{aligned} \quad (12.71)$$

где

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (12.72)$$

μ – приведенная масса.

Таким образом, в новых координатах гамильтониан запишется как

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + U(r) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + U(r), \quad (12.73)$$

а поскольку $[H, \hat{\mathbf{P}}] = 0$, т. е. полный импульс системы сохраняется, волновая функция системы представляется в виде произведения волновой функции, отвечающей движению центра масс с заданным импульсом $\mathbf{P}$, и волновой функции относительного движения ψ :

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}). \quad (12.74)$$

В с. ц. м. ($\mathbf{P} = 0$) для ψ получаем уравнение

$$\left| \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(r) \right| \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (12.75)$$

т. е. в результате мы пришли к уже знакомой задаче о движении частицы с массой μ в центральном поле $U(r)$ с фиксированным центром.

Таким образом, как и в классической механике, в нерелятивистской квантовой механике задача двух тел сводится к задаче одного тела в силовом поле неподвижного центра.

12.5.1. Учет движения ядра в задаче о движении в кулоновском поле

В качестве примера рассмотрим влияние движения ядра на спектр энергий атома водорода, который в случае бесконечной массы протона давался бы выражением Бора (1.32), следующим из соотношения (11.88) при $m = m_e$, где m_e – масса электрона:

$$E_n \equiv -\hbar \omega_n, \quad \omega_n = \frac{e^4 m_e}{2\hbar^3 n^2} \equiv \frac{R_\infty}{n^2}. \quad (12.76)$$

Здесь R_∞ – постоянная Ридберга. Точное решение уравнения Шредингера в кулоновском поле при бесконечной массе протона (ядра) дает тот же результат. Чтобы учесть массу ядра, нужно просто заменить массу электрона m_e на приведенную массу μ (в формуле (11.88) m как раз и есть приведенная масса) и посмотреть, как изменится спектр энергий:

$$\mu = \frac{m_e M}{M + m_e} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{M} \right). \quad (12.77)$$

Уточненный спектр частот излучения водородоподобного атома с зарядом ядра Z принимает вид

$$\omega_{n'n} = Z^2 R_\infty \left(1 - \frac{m_e}{M} \right) \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \equiv Z^2 R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (12.78)$$

Здесь

$$R \approx R_{\infty} \left(1 - \frac{m_e}{M} \right) - \quad (12.79)$$

уточненная на конечную массу ядра постоянна Ридберга.

Учет движения ядра позволил объяснить ряд непонятных ранее эффектов. Например, рассмотрим серию линий Бальмера ($n' = 2$) атомов обычного водорода (протия) с ядром $H = {}^1_1H = (p)$ и его изотопов: дейтерия $D = {}^2_1H = (p, n)$ и трития $T = {}^3_1H = (p, n, n)$, где в скобках указан протон-нейтронный состав ядер:

$$\omega_{2n}^{(i)} = R_{\infty} (1 - \delta_i) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad i = H, D, T; \quad (12.80)$$

$$\delta_H = \frac{1}{1840}, \quad \delta_D = \frac{1}{3680}, \quad \delta_T = \frac{1}{5520}.$$

Таким образом, поправки к спектру на конечность массы ядра различны для разных изотопов. Они приводят к *изотопическим смещениям спектральных линий*. Следовательно, изотопы могут быть обнаружены спектроскопическими методами. Это и было сделано. Оказалось, что в естественной смеси изотопов, (например, в природной воде) относительная концентрация изотопов водорода такова: $D/H \approx 1/6800$, $T/H \approx 10^{-18}$. Заметим, что радиоактивный тритий, несмотря на его нестабильность (β -распад в 3He с периодом полураспада $T_{1/2} = 12,3$ г.), присутствует в природе (в т. ч. и воде) в малых количествах, поскольку постоянно образуется в верхних слоях атмосферы в результате ядерных реакций, протекающих при соударении частиц космического излучения с ядрами атомов, например атмосферного азота или кислорода.

12.5.2. О спектральной серии Пикеринга

Другим важным и интересным приложением теории явилось объяснение обнаруженной в звездных спектрах излучения *спектральной серии Пикеринга*. Она приближенно описывается формулой, похожей на формулу Бальмера для атома водорода:

$$\omega_{2n_1}^{(H)} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right), \quad (12.81)$$

но содержит лишние линии, так как квантовое число n_1 принимает не только целые, но и полуцелые значения: $n_1 = 5/2, 3, 7/2, 4, 9/2, \dots$, которые запрещены для водорода (Пикеринг (1896) счел источником серии «особый вид водорода»).

Правильная интерпретация этой серии была предложена Бором в 1913 г., которая была подтверждена позднее, когда более точные спектроскопические

измерения показали, что линии серии несколько сдвинуты по сравнению с водородными, так что в указанной формуле (12.81) следует сделать замену:

$$R_{\text{H}} = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{1840} \right) \rightarrow R_{\text{He}} = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{7\,360} \right).$$

Кроме того, если положить в формуле (12.81) $n_1 = n/2$, получим формулу, не содержащую полуцелых квантовых чисел. В результате она принимает вид

$$\omega_{4n}^{(\text{He})} = 4R_{\text{He}} \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \equiv Z_{\text{He}}^2 R_{\text{He}} \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (12.82)$$

что есть не что иное, как формула, описывающая спектральную серию *однократно ионизованного атома гелия* ${}^4_2\text{He}^+ = (p, p, n, n) + e$, т. е. *водородоподобного иона с $Z = 2$* .

Глава 13. Системы тождественных частиц

13.1. Уравнение Шредингера для системы одинаковых частиц.

Принцип неразличимости одинаковых частиц

До сих пор мы рассматривали движение одной частицы в заданном внешнем поле (задача о двух взаимодействующих частицах свелась к предыдущей). Попытаемся понять, как можно обобщить полученные результаты на случай движения N одинаковых и взаимодействующих между собой частиц, помещенных во внешнее поле. Оператор Гамильтона такой N -частичной системы можно представить в виде

$$H = \sum_i^N \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(x_i, t) \right] + \sum_{i > k=1}^N V(x_i, x_k). \quad (13.1)$$

Здесь $V(x_i, x_k)$ – потенциальная энергия взаимодействия между i -й и k -й частицами, описывающая так называемое *парное взаимодействие частиц*, поэтому $i \neq k$, и в сумме $i > k$; x_i – все три координаты i -й частицы, определяющие положение ее центра тяжести, т. е. $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$, и еще четвертая, определяющая проекцию спина частицы (s_z), если она им обладает; $\hat{\mathbf{p}}_i = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_i}$ – оператор импульса i -й частицы; m – масса частиц; $U(x_i, t)$ – энергия взаимодействия i -й частицы с внешним полем.

Волновая функция такой системы одинаковых частиц удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (13.2)$$

и является функцией времени, спиновых переменных и пространственных координат всех частиц либо функцией времени, спиновых переменных и импульсов частиц и так далее в зависимости от выбора представления.

Заметим, что гамильтониан (13.1) является существенно нерелятивистским. Мы исключили из него непотенциальные поля (как, например магнитное), а также взаимодействия, которые зависят от скоростей частиц (магнитные силы). Все это, в принципе, можно было бы учесть, но это несколько не изменило бы ход дальнейших рассуждений.

Под одинаковыми частицами мы подразумеваем частицы с одинаковыми массами m , зарядами e , спинами s и так далее, так что в равных условиях (внешнее поле, присутствие других частиц) они ведут себя одинаковым образом. С точки зрения атомизма и молекулярной теории естественно, но совсем необязательно считать, что все экземпляры частиц одного рода (электроны, протоны, нейтроны и т. д.) между собой тождественны. В самом деле, измерение величин, характеризующих частицы (m , e , s), производится лишь с конечной точностью, поэтому можно предполагать, что, по крайней мере, в пределах погрешности разные экземпляры могут отличаться друг от друга.

Вопрос о том, одинаковы или неодинаковы все экземпляры одного рода частиц, можно было бы решить лишь в том случае, если бы поведение системы одинаковых частиц качественно отличалось от поведения аналогичной системы отличающихся частиц. Именно к такому качественному отличию свойств совокупности одинаковых частиц от свойств совокупности различных частиц приводит квантовая механика. Поэтому, опираясь на квантовую механику и опыт, можно решить, на первый взгляд, неразрешимый вопрос о том, тождественны ли друг другу все представители частиц одного рода или нет, а заодно и уточнить понятие этой тождественности. Причиной является то, что, в отличие от классической механики, где мы можем отследить каждую частицу по ее траектории, тем самым отличить частицы друг от друга, в квантовой механике принципиально не существует такой возможности следить в отдельности за каждой из одинаковых частиц и различать их.

Можно сказать, что в квантовой механике одинаковые частицы полностью теряют свою индивидуальность. Одинаковость частиц по их физическим свойствам имеет здесь весьма глубокий характер: она приводит к полной неразличимости частиц. Этот, как говорят, *принцип неразличимости* одинаковых частиц играет основную роль в квантовой теории систем, состоящих из одинаковых частиц.

Из выражения (13.1) непосредственно следует наиболее общая особенность гамильтониана системы тождественных (неразличимых) частиц. Если в нем мы переставим местами координаты k -й частицы (x_k) и l -й частицы (x_l), т. е. поменяем их местами, то гамильтониан не изменится, поскольку такая перестановка есть просто перестановка слагаемых в суммах, из которых состоит гамильтониан.

Таким образом, гамильтониан системы одинаковых частиц инвариантен (симметричен) относительно перестановки координат любой пары частиц.

Обозначим оператор перестановки частиц с номерами k и l через P_{kl} . Тогда условие одинаковости (неразличимости) частиц в системе выразится на математическом языке условием коммутации оператора Гамильтона (13.1) с оператором перестановки любой пары частиц системы, т. е.

$$HP_{kl} = P_{kl}H. \quad (13.3)$$

Так как операторы P_{kl} и H коммутируют между собой, то собственные значения оператора P_{kl} будут интегралами движения. Для определения собственных функций и собственных значений оператора перестановки двух частиц P_{12} рассмотрим систему, состоящую только из двух одинаковых частиц. В этом случае собственные функции оператора P_{12} должны удовлетворять уравнению

$$P_{12}\psi(1, 2) = \lambda\psi(1, 2), \quad (13.4)$$

где λ – собственное значение. Действуя на это уравнение еще раз оператором перестановки P_{12} , получаем

$$P_{12}^2\psi(1, 2) = \lambda^2\psi(1, 2). \quad (13.5)$$

С другой стороны, из определения P_{12} следует, что

$$P_{12}\psi(1, 2) = \psi(2, 1) \text{ и } P_{12}^2\psi(1, 2) = \psi(1, 2), \quad (13.6)$$

т. е.

$$\lambda^2 = 1 \text{ или } \lambda = \pm 1. \quad (13.7)$$

Таким образом, мы получили, что оператор перестановки имеет только два собственных значения $\lambda = \pm 1$. Собственная функция $\psi_S(1, 2)$, соответствующая значению $\lambda = 1$, называется *симметричной функцией* и определяется уравнением

$$P_{12}\psi_S(1, 2) = \psi_S(1, 2). \quad (13.8)$$

Собственная функция $\psi_A(1, 2)$, соответствующая собственному значению $\lambda = -1$, называется *антисимметричной функцией*. Она определяется уравнением

$$P_{12}\psi_A(1, 2) = -\psi_A(1, 2). \quad (13.9)$$

Из опыта следует, что система, состоящая из двух электронов, или двух протонов, или двух нейтронов во всех состояниях описывается только антисимметричными функциями. Система, состоящая из двух α -частиц или двух π -мезонов, всегда описывается симметричной функцией. Причем свойство симметрии по отношению к перестановкам пары частиц не меняется со временем в процессе эволюции системы, поскольку собственное значение оператора перестановки является интегралом движения и определяется исключительно типом частиц, входящих в состав системы.

Это утверждение непосредственно обобщается и на системы, состоящие из произвольного числа одинаковых частиц. В силу неразличимости частиц волновая функция системы должна обладать одинаковыми свойствами симметрии (быть симметричной либо антисимметричной) по отношению к перестановке любой пары частиц. Формально волновые функции систем, содержащих более двух частиц (как решения соответствующего уравнения Шредингера (13.1)), могут иметь и более сложную симметрию, однако в природе реализуются только симметричные или только антисимметричные состояния по отношению к перестановке каждой пары частиц. Свойство симметрии волновых функций системы не может измениться и внешним воздействием, так как из-за тождественности частиц внешнее возмущение всегда симметрично по отношению к перестановкам пар частиц.

Итак, в квантовой механике состояния систем одинаковых частиц описываются в зависимости от рода частиц либо симметричными, либо антисимметричными волновыми функциями. Антисимметричные функции описывают состояния систем, состоящих из электронов, протонов, нейтронов и других частиц (сложных или простых) с полуцелым спином ($1/2, 3/2, 5/2 \dots$). Системы, состоящие из частиц (сложных или простых), имеющих целый спин ($0, 1, 2 \dots$), описываются симметричными функциями. Эти правила являются обобщением накопленных опытных данных и образуют основной постулат – *принцип неразличимости одинаковых частиц*.

Частицы, образующие системы, описываемые антисимметричными функциями, называются *фермионами*. К ним, в частности, относятся так называемые *фундаментальные фермионы*, из которых построено все вещество в нашей Вселенной: это кварки (*u*-кварк, *d*-кварк, *s*-кварк) и лептоны (электрон – *e*, мюон – μ , τ -лептон – τ и соответствующие нейтрино ν_e , ν_μ , ν_τ), а также их античастицы. Все они имеют спин $1/2$.

Частицы, образующие системы, описываемые симметричными функциями, называются *бозонами*. В частности, к ним относятся и *фундаментальные бозоны*, обменом которыми обусловлены известные фундаментальные взаимодействия элементарных частиц. Все эти бозоны имеют спин, равный 1. Электромагнитные взаимодействия осуществляются обменом фотонами – γ с нулевой массой, слабые – массивными заряженными W^+ и W^- -бозонами, а также нейтральным Z -бозоном (их массы $\sim 100 m_p$), сильные взаимодействия обусловлены обменом восьмью цветными нейтральными *глюонами* с нулевой массой. И наконец, нейтральный бозон Хиггса – H , недавно открытый и называемый частицей Бога, имеет массу $\sim 126 \text{ ГэВ}/c^2$ и спин, равный нулю.

По-видимому, все элементарные частицы, существующие в природе, являются либо фермионами, либо бозонами.

В связи с принципом неразличимости одинаковых частиц необходимо несколько уточнить принцип суперпозиции состояний, о котором говорилось в главе 2. Не всякая линейная комбинация произвольных решений некоторого уравнения Шредингера для системы одинаковых частиц будет изображать возможные состояния этой системы. Возможные состояния системы определяются линейными комбинациями только таких функций, которые имеют одинаковые свойства симметрии по отношению к перестановкам пар частиц. Например, для систем, состоящих из электронов, в линейную комбинацию могут входить только антисимметричные волновые функции.

13.2. Симметричные и антисимметричные волновые функции

Уравнение Шредингера (13.1) может иметь решения, как имеющие, так и не имеющие определенной симметрии. Из всех этих решений для систем, состоящих из фермионов, нужно выбрать только описываемые антисимметричными функциями, а для систем бозонов – симметричными.

Рассмотрим систему из двух частиц, и пусть функция $\psi(1, 2)$ является одним из решений уравнения (13.1), тогда в силу неразличимости частиц функция $\psi(2, 1)$, образованная из $\psi(1, 2)$ путем перестановки частиц 1 и 2, также будет решением этого уравнения. Из этих решений легко составить функции, обладающие требуемой симметрией. Действительно, симметричная функция будет иметь вид

$$\psi_s = A[\psi(1, 2) + \psi(2, 1)], \quad (13.10)$$

аналогично для антисимметричной функции имеем

$$\psi_A = B[\psi(1, 2) - \psi(2, 1)]. \quad (13.11)$$

Такой процесс антисимметризации и симметризации волновых функций обобщается и на случай систем, состоящих из N одинаковых частиц. В такой системе возможны $N!$ различных перестановок частиц. Функция, соответствующая каждой перестановке, может быть получена из исходной $\psi(1, 2, \dots, N)$ путем последовательной перестановки пар частиц.

Обозначим $P_\nu \psi(1, 2, \dots, N)$ функцию, которая получается из $\psi(1, 2, \dots, N)$ в результате ν последовательных перестановок пар частиц. Тогда симметричную и антисимметричную функции можно записать в виде

$$\psi_S = A \sum_{\nu} P_{\nu} \psi(1, 2, \dots, N), \quad (13.12)$$

$$\psi_A = B \sum_{\nu} (-1)^{\nu} P_{\nu} \psi(1, 2, \dots, N), \quad (13.13)$$

где суммирование проводится по всем $N!$ -функциям, соответствующим различным возможным перестановкам N частиц системы.

Точное решение задачи многих частиц в квантовой механике наталкивается на непреодолимые математические трудности. Однако в ряде случаев основные особенности таких квантовых систем могут быть объяснены при использовании метода последовательных приближений, в котором в нулевом приближении частицы считаются независимыми (невзаимодействующими между собой), т. е. последним слагаемым в гамильтониане (13.1) пренебрегается, а в следующих порядках оно учитывается на основе теорий возмущений.

Итак, в нулевом приближении оператор Гамильтона системы частиц будет равен сумме операторов Гамильтона отдельных частиц:

$$H_0 = \sum_i^N \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(x_i) \right] \equiv \sum_i^N H(i). \quad (13.14)$$

В этом случае собственная функция оператора H_0 представится в виде произведения или линейной комбинации произведений собственных функций операторов $H(i)$ отдельных частиц, а собственное значение H_0 будет равно сумме собственных значений операторов $H(i)$.

Пусть функция $\varphi_{n_i}(i)$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера

$$[H(i) - \varepsilon_{n_i}] \varphi_{n_i}(i) = 0, \quad (13.15)$$

где i в скобках означает все координаты x_i i -й частицы; n_i — совокупность квантовых чисел, характеризующих ее квантовое состояние. Тогда собственные функции оператора H_0 , соответствующие собственному значению

$$E = \sum_i \varepsilon_{n_i},$$

будут линейными комбинациями произведений одночастичных функций $\varphi_{n_i}(i)$:

$$\varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2)\dots\varphi_{n_N}(N).$$

Для системы бозонов волновая функция должна иметь вид симметризованной суммы произведений (см. равенство (13.12)):

$$\psi_S = A \sum_v P_v \varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2)\dots\varphi_{n_N}(N). \quad (13.16)$$

Для систем фермионов функция в соответствии с соотношением (13.13) должна иметь вид

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_v (-1)^v P_v \varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2)\dots\varphi_{n_N}(N). \quad (13.17)$$

Вместо записи выражения (13.17) можно антисимметричную волновую функцию изобразить в виде определителя:

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(1) & \varphi_{n_1}(2) & \dots & \varphi_{n_1}(N) \\ \varphi_{n_2}(1) & \varphi_{n_2}(2) & \dots & \varphi_{n_2}(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{n_N}(1) & \varphi_{n_N}(2) & \dots & \varphi_{n_N}(N) \end{vmatrix}. \quad (13.18)$$

Изменение знака функции (13.18) при перестановке любой пары частиц непосредственно следует из свойств детерминанта при перестановке двух его соседних столбцов. Кроме того, из такой записи с очевидностью следует *принцип Паули*. Согласно этому принципу система одинаковых фермионов не может находиться в состояниях, которые описываются волновыми функциями, содержащими хотя бы два одинаковых одночастичных состояния. В самом деле, если среди одночастичных состояний $\varphi_{n_1}(1), \varphi_{n_2}(2), \dots, \varphi_{n_N}(N)$ имеется хотя бы два одинаковых, то определитель тождественно обращается в нуль.

Итак, в системе, состоящей из одинаковых фермионов, *две (или более) частицы не могут находиться в одинаковых состояниях*. Конечно, в такой формулировке принцип Паули может применяться только к системам слабо взаимодействующих частиц, когда можно говорить (хотя бы приближенно) о состояниях отдельных частиц.

В общем случае можно сказать, что система частиц удовлетворяет принципу Паули, если она описывается только антисимметричными волновыми функциями относительно перестановки пар частиц. Следует также отметить, что, хотя функция (13.18) характеризует состояния системы, в которых отдельные частицы находятся в одночастичных состояниях $n_1, n_2, \dots, n_N$, нельзя указать, какая именно частица находится в каждом из этих состояний.

В нерелятивистском приближении (и в отсутствие внешнего магнитного поля) оператор Гамильтона системы одинаковых частиц не содержит операторо-

ров спина частицы, потому при применении его к волновой функции никак не воздействует на спиновые переменные. Поэтому уравнению Шредингера удовлетворяет любая из компонент волновой функции, так что волновая функция системы может быть записана в виде произведения функции Φ , зависящей только от пространственных координат (координатная функция), на функцию χ , зависящую только от спиновых переменных (спиновая функция):

$$\psi(x_1 s_1, x_2 s_2, \dots, x_N s_N) = \Phi(x_1, x_2, \dots, x_N) \chi(s_1, s_2, \dots, s_N). \quad (13.19)$$

Волновую функцию (13.19) в виде произведения координатной и спиновой функций можно использовать в качестве первого приближения и при исследовании систем со взаимодействием, содержащим зависимость от спина.

Уравнение Шредингера (13.1) определяет по существу только координатную функцию Φ , оставляя функцию χ произвольной. Во всех случаях, когда сам спин частиц нас не интересует, можно, следовательно, применять уравнение Шредингера, рассматривая в качестве волновой функции одну только координатную функцию, что и делалось в предыдущем изложении.

Однако, несмотря на указанную независимость взаимодействия частиц от их спина, существует своеобразная зависимость энергии системы от ее полного спина, проистекающая в конечном итоге из принципа неразличимости одинаковых частиц.

13.3. Обменное взаимодействие

Рассмотрим систему, состоящую всего из двух одинаковых частиц. В результате решения уравнения Шредингера мы найдем ряд уровней энергии, каждому из которых соответствует определенная симметричная или антисимметричная координатная волновая функция $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.

Действительно, в силу тождественности частиц гамильтониан (а с ним и уравнение Шредингера) системы инвариантны по отношению к их перестановке. Если уровни энергии не вырождены, то при перестановке координат $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ функция $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ может измениться только на постоянный множитель. Производя же перестановку еще раз, как и ранее, убедимся, что этот множитель может быть равен только ± 1 .

Предположим сначала, что частицы имеют спин нуль. Спиновый множитель для таких частиц вообще отсутствует, и волновая функция сводится к одной лишь координатной функции $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, которая должна быть симметричной (поскольку частицы со спином нуль являются бозонами). Таким образом, не все из уровней энергии, получающихся при формальном решении уравнения Шредингера, могут осуществляться в реальности; те из них, которым соответствуют антисимметричные функции, для рассматриваемой системы невозможны.

Перестановка двух одинаковых частиц эквивалентна операции инверсии системы координат (начало которой выбрано посередине прямой, соединяющей обе частицы). С другой стороны, как мы видели ранее, в результате инверсии

волновая функция Φ должна умножиться на $(-1)^l$, см. выражение (10.79), где l – орбитальный момент относительного движения частиц.

Сопоставляя эти соображения со сказанным выше, мы видим, что система из двух одинаковых частиц со спином нуль может обладать только четным орбитальным моментом.

Далее, пусть система состоит из двух одинаковых частиц со спином $1/2$ (скажем, электронов). Тогда полная волновая функция системы (т. е. произведение функции $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и спиновой функции $\chi(\mu_1, \mu_2)$, где μ_1 и μ_2 – проекции спинов частиц 1 и 2, должна быть непременно антисимметричной по отношению к перестановке частиц. Поэтому при симметричной координатной функции спиновая функция должна быть антисимметричной, и наоборот.

Если частицы разные, то четыре возможных состояния системы из двух частиц со спином $1/2$ опишутся четырьмя произведениями функций (10.96):

$$\chi_{\frac{11}{22}}(1)\chi_{\frac{11}{22}}(2), \quad \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(2), \quad \chi_{\frac{11}{22}}(1)\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(2), \quad \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{11}{22}}(2). \quad (13.20)$$

Если же частицы тождественные, мы должны рассматривать симметричные и антисимметричные комбинации спиновых χ функций (13.20). Нетрудно видеть, что антисимметричных комбинаций всего одна:

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{\frac{11}{22}}(1)\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(2) - \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{11}{22}}(2) \right]. \quad (13.21)$$

Нормировочный множитель получается из условия $\langle \chi_{00} | \chi_{00} \rangle = 1$. В состоянии (13.21) проекции на ось z спинов двух частиц противоположны, поэтому проекция полного спина $S_z = s_{1z} + s_{2z} = 0$. Нетрудно показать, используя соотношение (10.93), что равны нулю и средние величины проекций: $\langle \chi_{00} | S_x | \chi_{00} \rangle = \langle \chi_{00} | S_y | \chi_{00} \rangle = 0$. Таким образом, функция χ_{00} описывает состояние системы с полным спином $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 = 0$, т. е. $S = 0$ и проекцией $S_z = 0$, что и отражено в индексах этой функции.

Симметричных же состояний три, так что они описывают состояния с полным спином $S = 1$ и проекциями $S_z = 1, 0, -1$:

$$\begin{aligned} \chi_{11} &= \frac{1}{2} \left[\chi_{\frac{11}{22}}(1)\chi_{\frac{11}{22}}(2) + \chi_{\frac{11}{22}}(2)\chi_{\frac{11}{22}}(1) \right] = \chi_{\frac{11}{22}}(1)\chi_{\frac{11}{22}}(2), \\ \chi_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{\frac{11}{22}}(1)\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(2) + \chi_{\frac{11}{22}}(2)\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(1) \right], \\ \chi_{1-1} &= \frac{1}{2} \left[\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(2) + \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(2)\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(1) \right] = \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(1)\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(2). \end{aligned} \quad (13.22)$$

Вычислим среднюю величину и направления спина $\mathbf{S}$ в состояниях (13.22), т. е. средние от всех проекций полного спина:

$$\langle \chi_{11} | \mathbf{S} | \chi_{11} \rangle, \langle \chi_{10} | \mathbf{S} | \chi_{10} \rangle, \langle \chi_{1-1} | \mathbf{S} | \chi_{1-1} \rangle.$$

Записав формулу (10.93) в виде

$$\begin{aligned} \sigma_x \chi_{\frac{11}{22}} &= \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}, & \sigma_x \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} &= \chi_{\frac{11}{22}}, \\ \sigma_y \chi_{\frac{11}{22}} &= i \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}, & \sigma_y \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} &= -i \chi_{\frac{11}{22}} \end{aligned} \quad (13.23)$$

в состояниях χ_{11} и χ_{1-1} имеем

$$\begin{aligned} \langle \chi_{11} | S_x | \chi_{11} \rangle &= \langle \chi_{11} | S_y | \chi_{11} \rangle = 0, & \langle \chi_{11} | S_z | \chi_{11} \rangle &= \langle \chi_{11} | s_{1z} + s_{2z} | \chi_{11} \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1, \\ \langle \chi_{1-1} | S_x | \chi_{1-1} \rangle &= \langle \chi_{1-1} | S_y | \chi_{1-1} \rangle = 0, & \langle \chi_{1-1} | S_z | \chi_{1-1} \rangle &= \langle \chi_{1-1} | s_{1z} + s_{2z} | \chi_{1-1} \rangle = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1. \end{aligned}$$

Таким образом, в этих состояниях средний вектор суммарного спина направлен по и против оси z и равен 1. Вычисление среднего спина в состоянии χ_{10} дает

$$\begin{aligned} \langle \chi_{10} | S_x | \chi_{10} \rangle &= \langle \chi_{10} | \frac{1}{2} (\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) | \chi_{10} \rangle = \\ &= \frac{1}{4} \left\langle \chi_{\frac{11}{22}}(1) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(2) + \chi_{\frac{11}{22}}(2) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(1) \left| (\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) \right| \chi_{\frac{11}{22}}(1) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(2) + \chi_{\frac{11}{22}}(2) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(1) \right\rangle = \\ &= \frac{1}{4} \left\langle \chi_{\frac{11}{22}}(1) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(2) \left| (\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) \right| \chi_{\frac{11}{22}}(1) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(2) \right\rangle + \\ &+ \frac{1}{4} \left\langle \chi_{\frac{11}{22}}(1) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(2) \left| (\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) \right| \chi_{\frac{11}{22}}(2) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(1) \right\rangle + \\ &+ \frac{1}{4} \left\langle \chi_{\frac{11}{22}}(2) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(1) \left| (\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) \right| \chi_{\frac{11}{22}}(1) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(2) \right\rangle + \\ &+ \frac{1}{4} \left\langle \chi_{\frac{11}{22}}(2) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(1) \left| (\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) \right| \chi_{\frac{11}{22}}(2) \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(1) \right\rangle = 0 + 0 + 0 + 0 = 0. \end{aligned} \quad (13.24)$$

Аналогично

$$\langle \chi_{10} | S_y | \chi_{10} \rangle = \langle \chi_{10} | \frac{1}{2} (\sigma_{1y} + \sigma_{2y}) | \chi_{10} \rangle = 0 + 0 + 0 + 0 = 0 \quad (13.25)$$

и

$$\langle \chi_{10} | S_z | \chi_{10} \rangle = \langle \chi_{10} | \frac{1}{2} (\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) | \chi_{10} \rangle = \frac{1}{4} - \frac{1}{4} + 0 + 0 - \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = 0, \quad (13.26)$$

т. е. в состоянии χ_{10} величина среднего вектора спина равна нулю, что можно интерпретировать как прецессию (или флуктуации) спина 1, направленного перпендикулярно оси z , вокруг этой оси.

Таким образом, в результате получается, что те уровни энергии, которым соответствуют симметричные решения $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ уравнения Шредингера, могут фактически осуществляться только при равном нулю полном спине системы, т. е. когда спины двух электронов антипараллельны, давая в сумме нуль. Значения же энергии, связанные с антисимметричными функциями $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, требуют полного спина, равного единице, т. е. спины обоих электронов должны быть параллельными.

Другими словами, возможные значения энергии системы электронов оказываются зависящими от ее полного спина (т. е. от взаимной ориентации спинов). На этом основании можно говорить о своеобразном взаимодействии частиц, приводящем к этой зависимости. Это взаимодействие называют *обменным* (его не нужно путать с взаимодействием, возникающим в результате обмена виртуальной частицей, например π -мезоном или фотоном). Обменное взаимодействие представляет собой чисто квантовый эффект, полностью исчезающий (как и сам спин) при предельном переходе к классической механике.

Проиллюстрируем сказанное выше на следующем примере системы двух невзаимодействующих частиц, которые могут быть различными либо тождественными: бозонами или фермионами (как еще говорят, подчиняющимися статистикам Больцмана, Бозе – Эйнштейна или Ферми – Дирака).

Пусть частицы находятся в одночастичных, ортонормированных состояниях $\varphi_m(\mathbf{r}_1)$ и $\varphi_n(\mathbf{r}_2)$. Когда частицы различимы, волновая функция системы двух частиц имеет вид

$$\Phi_{mn}^{\text{diff}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_m(\mathbf{r}_1)\varphi_n(\mathbf{r}_2), \quad \int \Phi_{mn}^{\text{diff}*}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\Phi_{mn}^{\text{diff}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2 = 1, \quad (13.27)$$

и плотность вероятности найти частицы вблизи точек $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$

$$W_{mn}^{\text{diff}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi_{mn}^{\text{diff}*}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\Phi_{mn}^{\text{diff}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = |\varphi_m(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_n(\mathbf{r}_2)|^2. \quad (13.28)$$

Вероятность найти одну частицу вблизи другой, т. е. при $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2$, определяется перекрытием волновых функций $\varphi_m(\mathbf{r})$ и $\varphi_n(\mathbf{r})$. Она максимальна, когда состояния совпадают, т. е. $m = n$.

Для бозонов будем иметь

$$\Phi_{mn}^B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\varphi_m(\mathbf{r}_1)\varphi_n(\mathbf{r}_2) + \varphi_m(\mathbf{r}_2)\varphi_n(\mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}, \quad \int \Phi_{mn}^{B*}\Phi_{mn}^B d^3r_1d^3r_2 = 1. \quad (13.29)$$

В этом случае вероятность найти одну частицу вблизи другой при $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2$

$$W_{mn}^B(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2) = 2W_{mn}^{\text{diff}}(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2). \quad (13.30)$$

Таким образом, по сравнению с отличающимися частицами одинаковые бозоны предпочитают «слипаться», т. е. как бы притягиваются друг к другу.

Для фермионов же (считаем их спины равными $1/2$), если спины параллельны, т. е. полный спин равен единице и спиновая часть волновой функции симметрична, радиальная часть должна быть антисимметричной:

$$\Phi_{mn}^{F\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\varphi_m(\mathbf{r}_1)\varphi_n(\mathbf{r}_2) - \varphi_m(\mathbf{r}_2)\varphi_n(\mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}, \quad \int \Phi_{mn}^{F\uparrow\uparrow*} \Phi_{mn}^{F\uparrow\uparrow} d^3r_1 d^3r_2 = 1. \quad (13.31)$$

В результате в этом случае при $m = n$ волновая функция обращается в нуль, что выражает принцип Паули: в данном состоянии не может находиться более одного фермиона (состояния обеих частиц в нашем случае характеризуются индексом $m = n$ и одинаковым направлением спина). Также волновая функция (13.31) обращается в нуль при $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2$, что можно рассматривать как взаимное отталкивание фермионов. Если же спины частиц противоположны ($S = 0$), т. е. спиновая часть функции антисимметрична, то пространственная часть должна быть симметричной:

$$\Phi_{mn}^{F\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\varphi_m(\mathbf{r}_1)\varphi_n(\mathbf{r}_2) + \varphi_m(\mathbf{r}_2)\varphi_n(\mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}, \quad \int \Phi_{mn}^{F\uparrow\downarrow*} \Phi_{mn}^{F\uparrow\downarrow} d^3r_1 d^3r_2 = 1, \quad (13.32)$$

поэтому частицы с противоположными спинами как бы притягиваются друг к другу. Эффективно это и есть обменные взаимодействия тождественных частиц, зависящие от их спинов.

13.4. О сложении угловых моментов

В предыдущем параграфе мы фактически провели операцию сложения двух угловых моментов со спинами $1/2$. Обобщим ее на случай произвольных моментов.

Напомним, что оператор любого углового момента $\hat{\mathbf{J}}$ определяется коммутационными соотношениями (см. выражения (5.74, 10.4)) для его компонент $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y. \quad (13.33)$$

В частности, оператор орбитального момента имеет вид $\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\mathbf{r} \times \nabla$. Операторы орбитального момента и спина подчиняются одним и тем же коммутационным соотношениям (13.33). В дальнейшем будем использовать безразмерные угловые моменты, т. е. под $\hat{\mathbf{J}}$ будем подразумевать $\hat{\mathbf{J}}/\hbar$. Это эквивалентно тому, что в соотношениях (13.33) мы положили $\hbar = 1$.

Из формул (13.33) следует, что оператор квадрата момента $\hat{J}^2 = \hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ коммутирует со всеми проекциями, в частности $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$, следовательно, $\hat{J}^2, \hat{J}_z$ имеют общий набор собственных функций ϕ_{JM} :

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 \phi_{JM} &= J(J+1) \phi_{JM}, \\ \hat{J}_z \phi_{JM} &= M \phi_{JM}.\end{aligned}\quad (13.34)$$

Здесь квантовое число J , называемое *моментом количества движения*, может быть целым или полуцелым, проекция M пробегает $2J+1$ значений от $-J$ до $+J$.

Для спина $J = s = \frac{1}{2}$ соответствующие операторы проекций принято выражать через матрицы Паули:

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} \sigma_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2} \sigma_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \sigma_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{pmatrix} \equiv \frac{3}{4} I, \quad (13.35)$$

где I – единичная матрица. Таким образом,

$$\begin{aligned}\hat{s}^2 \chi_{\frac{1}{2}\mu} &= s(s+1) \chi_{\frac{1}{2}\mu} = \frac{3}{4} \chi_{\frac{1}{2}\mu}, \\ \hat{s}_z \chi_{\frac{1}{2}\mu} &= \mu \chi_{\frac{1}{2}\mu}.\end{aligned}\quad (13.36)$$

Простейшее (каноническое) представление для спинора $\chi_{\frac{1}{2}\mu}$ –

$$\chi_{\frac{11}{22}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (13.37)$$

13.4.1. Сложение двух угловых моментов

Пусть имеется система, состоящая из двух невзаимодействующих подсистем. Тогда ее гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2. \quad (13.38)$$

Для каждой из подсистем можно определить операторы $\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z}; \hat{j}_2^2, \hat{j}_{2z}$.

Обозначим собственные функции (состояния) подсистем как $|j_1 m_1\rangle$ и $|j_2 m_2\rangle$, тогда для всей системы возможны два представления.

1. Состояния системы можно описать всеми возможными произведениями $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ для всех значений m_1, m_2 . Число состояний всей системы с гамильтонианом H будет равно $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. В этом случае полный набор коммутирующих операторов следующий: $\hat{H}, \hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z}, \hat{j}_2^2, \hat{j}_{2z}$.

2. Имеется другое описание той же системы. Построим оператор ее полного углового момента:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2 \text{ или } \hat{J}_i = \hat{j}_{1i} + \hat{j}_{2i} \quad (i = x, y, z). \quad (13.39)$$

Его компоненты также удовлетворяют коммутационным соотношениям (13.33), так что можно построить собственные функции операторов $\hat{\mathbf{J}}^2$ и $\hat{J}_z$. Обозначим их как $|JM j_1 j_2\rangle$, поскольку оператор

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{j}}_1^2 + \hat{\mathbf{j}}_2^2 + 2(\hat{\mathbf{j}}_1 \hat{\mathbf{j}}_2), \quad (13.40)$$

как нетрудно видеть, коммутирует с $\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}_2^2$ (но не с проекциями j_{1i}, j_{2i}). Тогда имеем

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |JM j_1 j_2\rangle &= J(J+1) |JM j_1 j_2\rangle, \\ \hat{J}_z |JM j_1 j_2\rangle &= M |JM j_1 j_2\rangle. \end{aligned} \quad (13.41)$$

Здесь, как мы увидим ниже, J может принимать значения

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2. \quad (13.42)$$

Собственное значение оператора проекции $\hat{J}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$ полного момента равно

$$M = m_1 + m_2. \quad (13.43)$$

Каждому значению J соответствует $2J + 1$ возможных значений M от $-J$ до $+J$.

Наибольшее возможное (при заданных j_1 и j_2) значение $M = j_1 + j_2$. Оно получается при максимальных значениях проекций моментов подсистем $m_1 = j_1$ и $m_2 = j_2$. Поэтому и наибольшее значение J есть $J = j_1 + j_2$. Это единственное возможное состояние с максимальной проекцией суммарного момента $M = J$ записывается как $|JJ j_1 j_2\rangle = |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle$.

Значение проекции полного момента $M = J - 1$ получается двумя способами: $m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 1$ и $m_1 = j_1 - 1, m_2 = j_2$, т. е. имеются два состояния с такой проекцией. Одно из них является состоянием с полным моментом $J = j_1 + j_2 - 1$ и максимальной проекцией, другое имеет момент $J = j_1 + j_2$. Остальные значения J можно определить аналогично, складывая друг с другом различные допустимые значения m_1 и m_2 для каждого значения M и приписывая получаемым состояниям разные J (табл. 13.1).

Таблица 13.1

Допустимые значения m_1 и m_2 для каждого значения M и возможные значения J

M	m_1	m_2	J
$j_1 + j_2$	j_1	j_2	$j_1 + j_2$
$j_1 + j_2 - 1$	j_1	$j_2 - 1$	$j_1 + j_2 - 1$
	$j_1 - 1$	j_2	$j_1 + j_2$
$j_1 + j_2 - 2$	j_1	$j_2 - 2$	$j_1 + j_2 - 2$
	$j_1 - 1$	$j_2 - 1$	$j_1 + j_2 - 1$
	$j_1 - 2$	j_2	$j_1 + j_2$

Таким образом, наибольшее возможное значение M есть $M = j_1 + j_2$. Ему отвечает одно состояние $|JM\rangle$ (единственная пара значений m_1, m_2). Далее, имеются два состояния $|JM\rangle$ с $M = j_1 + j_2 - 1$. Следовательно, должны быть и два состояния $|JM\rangle$ с этим значением M : одно, отвечающее $J = j_1 + j_2$, другое – с моментом $J = j_1 + j_2 - 1$. При $j_1 \geq j_2$ с уменьшением M на единицу число состояний с таким M будет также увеличиваться на единицу вплоть до $M = j_1 - j_2$. При этом $m_1 = j_1 - j_2, m_2 = 0$. При дальнейшем уменьшении M число состояний перестанет возрастать, оставаясь равным $2j_2 + 1$ (если $j_1 \geq j_2$). Это значит, что $J = |j_1 - j_2|$ есть наименьшее возможное значение J .

Число всех состояний $|JM\rangle$

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = 2j_2+1 + 2 \sum_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2} J = (2j_2+1)(2j_1+1). \quad (13.44)$$

Те же функции являются собственными и для операторов $\hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2$. Полный набор операторов в этом случае есть $\hat{H}, \hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$. Операторы $\hat{j}_{1z}, \hat{j}_{2z}$ не коммутируют с оператором $\hat{J}^2$, как следует из равенства (13.40).

Таким образом, эти два представления не совпадают друг с другом. Но они описывают одну и ту же систему и должны быть связаны унитарным преобразованием. Согласно формуле (4.59) имеем

$$\begin{aligned} |JMj_1j_2\rangle &= \sum_{m_1, m_2} \langle j_1m_1j_2m_2 | JM \rangle |j_1m_1j_2m_2\rangle \equiv \\ &\equiv \sum_{m_1, m_2} C(j_1m_1j_2m_2 | JM) |j_1m_1\rangle |j_2m_2\rangle \equiv \sum_{m_1, m_2} C_{j_1m_1j_2m_2}^{JM} |j_1m_1\rangle |j_2m_2\rangle. \end{aligned} \quad (13.45)$$

Коэффициенты (матричные элементы) этого преобразования носят название *коэффициентов Клебша – Гордана*:

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM} \equiv C(j_1 m_1 j_2 m_2 | JM) \equiv \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle. \quad (13.46)$$

Мы их нашли для случая сложения двух спинов, равных $\frac{1}{2}$. Нахождение коэффициентов Клебша – Гордана выходит за рамки нашего курса, но они табулированы, и их величины можно найти, например, в работах [47, 48].

13.5. Электроны в атоме. Периодическая система элементов

Атом с более чем одним электроном представляет собой сложную систему взаимодействующих друг с другом электронов, движущихся в поле ядра. Для такой системы можно, строго говоря, рассматривать только состояния системы в целом. Тем не менее оказывается, что в атоме можно с хорошей точностью ввести понятие о состояниях каждого электрона в отдельности как о стационарных состояниях движения электрона в некотором эффективном (самосогласованном) центрально-симметричном поле.

В этом приближении предполагается, что каждый атомный электрон движется в сферически-симметричном поле, которое характеризуется потенциальной энергией $V(r)$, определяемой ядром и всеми другими электронами атома. Приближение будет хорошим в том случае, когда отклонение потенциальной энергии отдельного электрона от $V(r)$, вызванное прохождением вблизи других электронов, будет относительно мало. Это и в самом деле имеет место, так как постоянный ядерный кулоновский потенциал примерно в Z раз больше флуктуирующего потенциала, создаваемого проходящими поблизости электронами. Заметим, что для различных электронов в атоме средние поля, вообще говоря, различны, причем определяться они должны одновременно все, поскольку каждое из них зависит от состояния электрона и состояний всех остальных электронов. Поэтому такое поле называется *самосогласованным*. Таким образом, в теории атома возникают две основные задачи: вычисление среднего центрального поля и определение поправок к результатам, полученных с его помощью.

Обсудим некоторые общие свойства центрального поля. На больших расстояниях r от ядра потенциальная энергия любого электрона нейтрального атома $V(r)$ имеет кулоновский вид $-e^2/r$, поскольку при удалении электрона, для которого измеряется потенциал, остается отдельный положительно заряженный ион.

Ранее мы показали, что в атоме водорода, когда потенциальная энергия при всех r равна $-e^2/r$, электрон имеет бесконечное число дискретных уровней энергии (см. выражение (11.92)), характеризуемых квантовыми числами n , l и m . Для средней потенциальной энергии $V(r)$ также можно ожидать наличия бесконечного числа уровней энергии, поскольку при больших n волновая функция электрона вблизи ядра будет мала и главную роль будет играть вид $V(r)$ при больших r . Однако между этими двумя случаями имеется важное

различие, заключающееся в том, что вырождение водородных состояний, соответствующих различным l при данном n , в некулоновском центральном поле снимается. Это связано с тем, что при малых значениях момента количества движения электрон в среднем ближе подходит к ядру, а там притяжение сильнее, чем когда $V(r) = -e^2/r$, так как ядро уже не так полно экранируется другими электронами. Поэтому при заданном n состояния с меньшим значением l будут обладать меньшей энергией. С другой стороны, вырождение по азимутальному квантовому числу m не снимается, так как оно имеет место в любом сферически-симметричном потенциале.

Из-за наличия спина состояние электрона в центральном поле задается четырьмя квантовыми числами: n , l , m и μ . Орбитальные квантовые числа l и m – те же, что и l и m в атоме водорода; число $\mu = \pm 1/2$ характеризует ориентацию спина, а n представляет собой естественное обобщение главного квантового числа кулоновской задачи. Поскольку величина $n - l - 1$ представляет собой число узлов радиальной части волновой функции атома водорода, такое определение n переносится и на случай произвольного центрального поля, так что l не превышает $n - 1$.

13.5.1. Периодическая система элементов

В соответствии с принципом Паули данными четырьмя квантовыми числами может обладать только один электрон в атоме. При увеличении Z электроны заполняют последовательные состояния от низшей до более высоких энергий. Основным состоянием атома будет то, в котором нет не заполненных электронами состояний с энергией меньшей, чем энергия любого из заполненных состояний. В силу вырождения по квантовым числам m и μ состояние с квантовыми числами n и l может содержать $2(2l + 1)$ электронов с одной и той же энергией. Отсюда ясно, что конфигурацию электронов в атоме, находящемся в основном состоянии, можно описать, задавая число электронов в каждом из состояний. Совокупность электронов в состояниях с близкими энергиями образует электронную оболочку. В приближении центрального поля все оболочки, в которых есть электроны, будут заполнены, кроме, возможно, валентной оболочки с наибольшей энергией.

Химические свойства атомов определяются главным образом наименее сильно связанными, или *валентными*, электронами, находящимися в оболочке с наибольшей энергией. Наиболее важными факторами являются число занятых и незанятых состояний в ней и разность энергий между данной и следующей, более высокой (незаполненной) оболочкой. Например, если верхняя оболочка заполнена и разность энергий между ней и более высокой оболочкой имеет заметную величину, то в химическом отношении атом имеет тенденцию оставаться инертным, так как в этом случае переход электронов на другие атомы (или приход электронов с них), необходимый для образования молекулы, происходит с трудом. Квазипериодическая повторяемость структуры верхних обо-

лочек по мере возрастания атомного номера Z обуславливает существование периодической системы химических элементов Менделеева.

В обычных спектроскопических обозначениях квантовое число n , характеризующее оболочку, записывается числом, l – буквой, а число электронов в оболочке характеризуется численным индексом. Систему буквенных обозначений для l мы уже обсуждали.

Ниже указано максимальное число $2(2l + 1)$ электронов, которые могут находиться в состоянии с орбитальным квантовым числом l (табл. 13.2).

Таблица 13.2

**Максимально возможное число электронов
в состоянии с заданным орбитальным моментом l**

Параметр	Значение					
Орбитальное квантовое число l	0	1	2	3	4	5
То же число l в буквенном обозначении	s	p	d	f	g	h
Максимальное число электронов $2(2l + 1)$	2	6	10	14	18	22

Таким образом, электронная конфигурация основного состояния атома, например натрия ($Z = 11$), запишется следующим образом: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Такие электронные конфигурации многих элементов можно получить, зная только последовательность, в которой возрастают энергии состояний электронов. Сведения о ней можно получить из спектроскопических данных.

Состояния отдельного электрона в атоме при заданном l нумеруют (в порядке возрастания энергии) с помощью главного квантового числа n , пробегающего значения $n = l + 1, l + 2, \dots$. Такой выбор порядка нумерации соответствует принятому для атома водорода. Но последовательность возрастания уровней энергии с различными l в сложных атомах, вообще говоря, отличается от имеющейся у атома водорода. Оказывается, что эта последовательность такова:

$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, [4s, 3d], 4p, [5s, 4d], 5p, [6s, 4f, 5d], 6p, [7s, 5f, 6d]$.

В квадратных скобках указаны состояния, имеющие почти одинаковую энергию, так что оболочки необязательно заполняются в указанном порядке. Близость энергий этих состояний связана с тем, что увеличение n и уменьшение l приводит к противоположным результатам. Так, состояние $4s$ (которое в атоме водорода лежит выше, чем $3d$) сдвигается вниз благодаря тому, что при малом моменте количества движения электрон глубже проникает внутрь атома (см. ниже). Внутри каждой скобки s -состояние всегда заполняется первым, хотя оно может терять один или оба электрона по мере заполнения других указанных в скобках состояний. Исключая состояния, стоящие в скобках, указанный здесь порядок заполнения всегда соблюдается.

Такая последовательность энергетических состояний электронов в атомах в порядке возрастания энергии указана в табл. 13.3. В каждой строчке таблицы приведены состояния, мало отличающиеся по энергии. Разности энергий состо-

яний, соответствующих разным строчкам таблицы, сравнительно велики. Совокупность состояний, входящих в каждую строчку таблицы, образует *электронную оболочку*. Оболочка состоит из *s*-, *p*-, *d*- ... подоболочек.

Таблица 13.3

Электронные оболочки в атомах

Номер оболочки	Электронные состояния	Полное число состояний в оболочке
1	1s	2
2	2s, 2p	8
3	3s, 3p	8
4	4s, 3d, 4p	18
5	5s, 4d, 5p	18
6	6s, 4f, 5d, 6p	32
7	7s, 6d, 5f...	...

Как видно из таблицы, энергии состояний в сложных атомах отличаются от энергии состояний атома водорода. Например, в атоме водорода состояния 3s, 3p, 3d имеют одинаковую энергию, а в сложных атомах энергии этих состояний различны. Наименьшее значение энергии имеет состояние 3s, наибольшее значение энергии – состояние 3d. Эта разница в энергии может быть понята на основе простых качественных рассуждений, если учесть самосогласованное поле, действующее на данный электрон со стороны других электронов. Для учета этого эффекта можно в первом приближении использовать волновые функции водородоподобных атомов. Как показано ранее, в состояниях с орбитальным моментом l радиальная часть волновой функции из-за наличия центробежного потенциала отталкивания убывает как r^l при $r \rightarrow 0$.

Следовательно, электроны в *s*-состояниях могут подходить ближе к ядру, чем электроны *d*- или *f*-состояний, поэтому электроны *s*-состояний чувствуют больший заряд ядра и испытывают более сильное его притяжение, чем электроны *d*- и *f*-состояний. В связи с этим энергия состояния 4s оказывается меньшей, чем у состояния 3d. Особенно существенно экранировка сказывается в *f*-состояниях, например уровень 4f оказывается выше уровня 6s.

В основном состоянии атомов электроны заполняют в согласии с принципом Паули нижние энергетические состояния. В атоме гелия (${}^2\text{He}$) два электрона заполняют первую оболочку (1s)²; в атоме неона (${}^{10}\text{Ne}$) полностью заполнены две оболочки – конфигурация (1s)²(2s)²(2p)⁶; три оболочки заполнены у атома аргона (${}^{18}\text{Ar}$); четыре – у атома криптона (${}^{36}\text{Kr}$); пять – у ксенона (${}^{54}\text{Xe}$) и шесть оболочек заполнено у атома радона (${}^{86}\text{Rn}$). У перечисленных атомов с заполненными оболочками суммарный орбитальный момент и суммарный спин равны нулю. Эти атомы очень устойчивы, с большим трудом вступают в хими-

ческие соединения с другими атомами и слабо взаимодействуют между собой (инертные газы).

Начало каждой новой оболочки заполняется электроном в s -состоянии. Все атомы с одним электроном сверх заполненных оболочек имеют близкие химические свойства и относятся к щелочным металлам: ${}^3\text{Li}$, ${}^{11}\text{Na}$, ${}^{19}\text{K}$, ${}^{37}\text{Rb}$, ${}^{55}\text{Cs}$, ${}^{87}\text{Fr}$.

В таблице 13.4 указаны электронные конфигурации атомов первых 18 элементов периодической системы Менделеева.

Таблица 13.4

Электронные конфигурации атомов

Номер оболочки	Z	Элемент	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$
I	1	H	1	—	—	—	—
	2	He	2	—	—	—	—
II	3	Li	2	1			
	4	Be	2	2			
	5	B	2	2	1		
	6	C	2	2	2		
	7	N	2	2	3	—	—
	8	O	2	2	4		
	9	F	2	2	5		
	10	Ne	2	2	6		
III	11	Na	2	2	6	1	
	12	Mg	2	2	6	2	
	13	Al	2	2	6	2	1
	14	Si	2	2	6	2	2
	15	P	2	2	6	2	3
	16	S	2	2	6	2	4
	17	Cl	2	2	6	2	5
	18	Ar	2	2	6	2	6

В четвертой и пятой электронных оболочках имеется по 18 состояний. В шестой электронной оболочке имеется 32 различных состояния. Среди этих состояний 14 состояний относятся к типу $4f$. Как уже отмечалось выше, радиальные функции f -состояний быстро убывают при $r \rightarrow 0$. На рисунке 13.1 указано радиальное распределение электрического заряда в водородоподобных атомах для состояний типа $4s$, $4p$ и $4f$. Мы видим, что в состоянии $4f$ электрон хотя и не подходит близко к ядру, однако находится в областях атома более глубоких, чем внешние области, куда простираются состояния $4p$ и особенно $4s$. Еще более внешние области атома занимают электронами в состояниях $5s$ и $6s$.

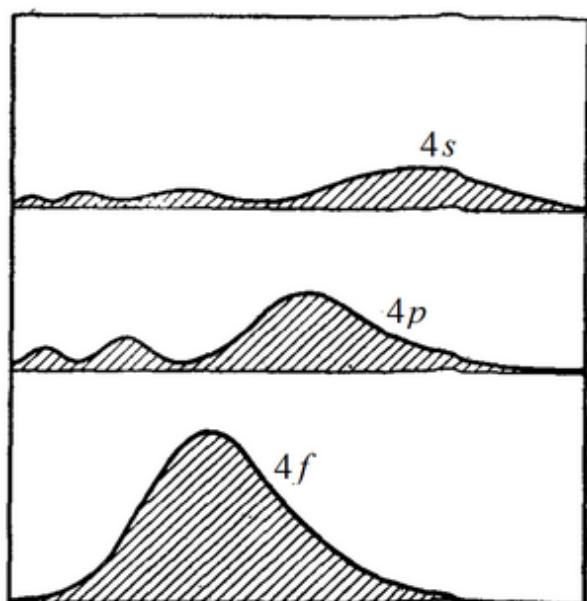


Рис. 13.1. Радиальное распределение электрического заряда в водородоподобных атомах для состояний $4s$, $4p$, $4f$

Состояния $4f$ начинают заполняться после элемента лантана (${}_{57}\text{La}$) с $Z = 57$, у которого 54 электрона заполняют первые пять оболочек, а состояние трех остальных электронов определяется конфигурацией $(5d)(6s)^2$. В атомах следующих 14 элементов: ${}_{58}\text{Ce}$, ${}_{59}\text{Pr}$, ${}_{60}\text{Nd}$, ${}_{61}\text{Pm}$, ${}_{62}\text{Sm}$, ${}_{63}\text{Eu}$, ${}_{64}\text{Gd}$, ${}_{65}\text{Tb}$, ${}_{66}\text{Dy}$, ${}_{67}\text{Ho}$, ${}_{68}\text{Er}$, ${}_{69}\text{Tm}$, ${}_{70}\text{Yb}$, ${}_{71}\text{Lu}$, которые называются *лантаноидами* (*лантанидами*), или *редкоземельными элементами*, заполняются состояния $4f$. Поскольку электроны состояний $4f$ располагаются во внутренних областях атома, то внешний слой у лантана и редкоземельных атомов остается почти неизменным (конфигурация $(6s)^2$), поэтому химические свойства этих элементов очень близки и их относят к одной клетке периодической системы элементов, занимаемой лантаном.

В другой группе элементов: ${}_{90}\text{Th}$, ${}_{91}\text{Pa}$, ${}_{92}\text{U}$, ${}_{93}\text{Np}$, ${}_{94}\text{Pu}$, ${}_{95}\text{Am}$, ${}_{96}\text{Cm}$, ${}_{97}\text{Bk}$, ${}_{98}\text{Cf}$, ${}_{99}\text{Es}$, ${}_{100}\text{Fm}$, ${}_{101}\text{Md}$... – последовательное увеличение числа электронов в атоме соответствует заполнению оболочки $5f$ без изменения конфигурации внешних электронов. Конфигурация внешних электронов $(7s)^2$ одинакова у всех этих элементов и совпадает с конфигурацией атомов актиния ${}_{89}\text{Ac}$, поэтому такие элементы называют *актинидами* и относят к одной клетке периодической системы элементов, занимаемой элементом актинием.

Оболочечная структура электронных состояний атомов, следующая из законов движения электронов, объясненных квантовой механикой, была в некоторой степени предугадана замечательным русским химиком Д. И. Менделеевым в 1868 г. задолго до появления квантовой механики.

Менделеев открыл периодический закон химических элементов, который он выразил в виде таблицы Периодической системы элементов по группам и рядам. Периодическая система элементов Менделеева состоит из десяти горизонтальных рядов, которые составляют семь периодов, и девяти групп (вертикальных столбцов), в которых один под другим расположены сходные между собой элементы. Первоначальная таблица Менделеева содержала только восемь групп, так как инертных газов в то время еще не знали. Проведенное Менделеевым размещение элементов в периодической системе оказалось полностью от-

ражающим строение атомов, найденное современной квантовой механикой. Каждому периоду системы элементов Менделеева соответствует одна электронная оболочка в атоме.

13.6. Оболочечная модель атомного ядра

Атомные ядра представляют собой образования из протонов с зарядом $+1$ (в единицах заряда электрона) и нейтральных нейтронов. Протоны и нейтроны по отношению к ядерным взаимодействиям ведут себя одинаково, поэтому имеют общее название – *нуклоны*. Они имеют спин $1/2$ и массу, примерно в 1840 раз превышающую массу электрона. Между этими частицами действуют ядерные силы малого радиуса действия (порядка 10^{-13} см); между протонами также действуют обычные кулоновские силы отталкивания. Чтобы ядро не разваливалось, ядерное взаимодействие между нуклонами должно существенно превосходить кулоновское отталкивание между протонами. Это взаимодействие, называемое *сильным*, должно быть также зарядово-независимым. Малый радиус действия этого взаимодействия следовал уже из опытов Резерфорда по рассеянию α -частиц на ядрах атомов, поскольку никакого отличия от чисто кулоновского рассеяния при сближении α -частиц с ядром вплоть до расстояний порядка радиуса ядра не наблюдалось. Такая же оценка на радиус действия ядерных сил следует из детальных опытов по рассеянию нейтронов разных энергий ядрами для объяснения изотропии углового распределения рассеянных нейтронов вплоть до энергии ~ 10 МэВ.

13.6.1. О свойствах ядерных сил, действующих между нуклонами

Важной величиной, характеризующей ядерные силы, удерживающие нуклоны в ядре, является энергия связи ядра. Это энергия, необходимая для разделения ядра на составляющие его нуклоны. Оказалось, что для всех средних и тяжелых ядер энергия связи, приходящаяся на один нуклон (удельная энергия связи), приблизительно одинакова и составляет около 8 МэВ/нуклон, т. е. полная энергия связи $E_{\text{св}} \sim A$. Это свойство *насыщения* ядерных сил. Оно заключается в том, что удельная энергия связи в зависимости от числа нуклонов A в ядре сначала растет при малых A , достигает максимума при $A = 56$ (по этой причине эволюция не очень массивных звезд заканчивается «железной звездой»), далее очень плавно убывает (а практически выходит почти на плато – насыщение, величина которого и составляет ~ 8 МэВ/нуклон, рис. 13.2).

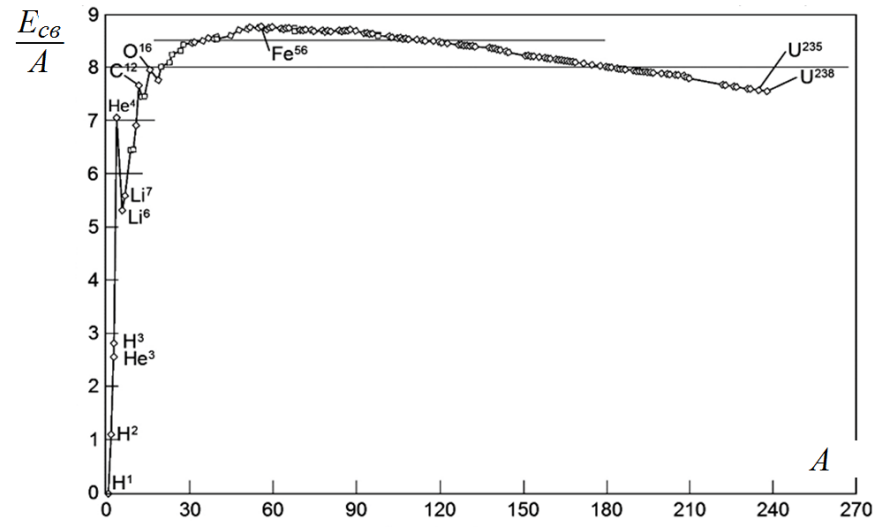


Рис. 13.2. Зависимость энергии связи на один нуклон $E_{св}/A$ в зависимости от атомного номера A (числа нуклонов в ядре)

В этом отношении ядра подобны жидкости или твердому телу, для которых количество тепла, необходимое для испарения, пропорционально массе вещества и резко отличается от нейтральных атомов, где происходит рост средней энергии связи на один электрон с увеличением числа электронов.

Из опытов по рассеянию нейтронов, протонов, электронов и других экспериментов на тяжелых ядрах было найдено, что плотность нуклонов в ядре приблизительно постоянна, быстро спадает вблизи границы ядра, т. е. ядра имеют довольно резкую границу. Таким образом, ядерная материя и в этом отношении подобна несжимаемой жидкости, а объем V_N ядра, как и энергия связи, так же пропорционален A : $V_N \sim A$. Тогда, вводя радиус ядра R_N , условный объем одного нуклона V_0 и его радиус r_0 , можно написать $V_N = AV_0$ или $(4/3)\pi R_N^3 = 4/3\pi r_0^3 A$. Таким образом, радиусы ядер приближенно описываются формулой

$$R_N = r_0 A^{1/3}, \quad (13.47)$$

где из экспериментов по рассеянию частиц на ядрах следует $r_0 = 1,2$ Фм, $1 \text{ Фм} = 10^{-13} \text{ см}$. Эта единица, используемая в ядерной физике, называется *ферми* (Фм). По величине она совпадает с фемтометром (фм), $1 \text{ Фм} = 1 \text{ фм}$. Из экспериментов по α -распаду ядер получается несколько большая величина r_0 .

Формула (13.47) соответствует постоянной плотности n_N числа нуклонов внутри ядер:

$$n_N = A/V_N = 1/V_0 = 1/\frac{4}{3}\pi r_0^3 = 0,14 \text{ Фм}^{-3} \quad (13.48)$$

или $V_0 = 7,2 \text{ Фм}^3$, т. е. на один нуклон приходится $7,2 \text{ Фм}^3$. Таким образом, плотность ядерной материи

$$\rho_N = \frac{m_p}{V_0} = \frac{1,67 \cdot 10^{-24} \text{ г}}{7,2 \cdot 10^{-39} \text{ см}^3} = 2,3 \cdot 10^{14} \frac{\text{г}}{\text{см}^3} = 230 \frac{\text{млн т}}{\text{см}^3}. \quad (13.49)$$

Чтобы объяснить малую энергию связи дейтона (2,23 МэВ, т. е. ~ 1 МэВ/нуклон) по сравнению с тритием ^3H (8,5 МэВ, ~ 3 МэВ/нуклон) и гелием ^4He (28 МэВ, ~ 7 МэВ/нуклон), а также быстрый выход удельной энергии связи с ростом A на насыщение, казалось бы, хорошо подходит описание межнуклонного взаимодействия узким и глубоким потенциалом. Действительно, в этом случае каждый нуклон взаимодействует только с несколькими ближайшими соседями, которые и будут определять его энергию связи. Поэтому энергия связи, приходящаяся на один нуклон, не будет зависеть от A и будет постоянна (насыщение), как в жидкости или твердом теле.

Однако, как указал Е. Вигнер (см., например, работу [49]), явление насыщения приводит еще к некоторым важным ограничениям на свойства ядерных сил между нуклонами. Например, данное взаимодействие не может иметь всюду характер притяжения. В этом случае не было бы насыщения, все частицы стремились бы слиться, взаимно проникая друг в друга (коллапс). Объем ядра не увеличивался бы с ростом A , а энергия связи ядра была бы пропорциональна числу связей между всеми частицами, т. е. $E_{\text{св}} \sim A(A-1)/2 \sim A^2$, а не A , как это следует из опыта. Для объяснения насыщения следует предположить еще и наличие отталкивания нуклонов на малых расстояниях, т. е. твердой сердцевины (кора) внутри нуклона. Только в этом случае объем ядра будет возрастать $\sim A$, а энергия связи на один нуклон выйдет на насыщение.

Основную информацию о сильных нуклон-нуклонных взаимодействиях получают из опытов по рассеянию нейтронов и протонов на протонах в широком диапазоне энергий. По сечениям и угловым распределениям восстанавливают вид потенциала. Такой анализ не совсем однозначен, но он позволил установить основные свойства потенциала. В частности, было установлено, что ядерные взаимодействия в системах «нейтрон – протон», «протон – протон» и «нейтрон – нейтрон» одинаковы с большой степенью точности, т. е. ядерные силы зарядово-независимы. Приблизительная радиальная зависимость нуклон-нуклонного потенциала указана на рис. 13.3.

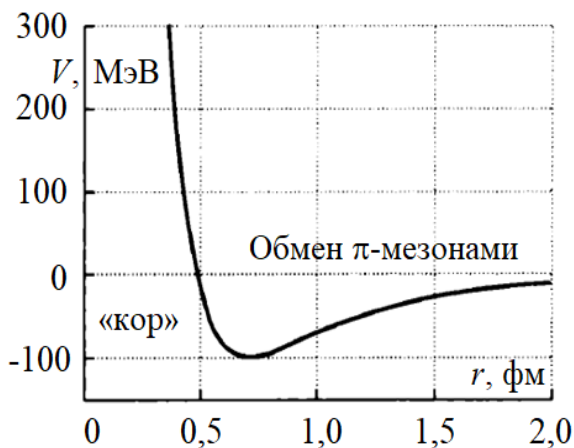


Рис. 13.3. Поведение нуклон-нуклонного потенциала в зависимости от расстояния между нуклонами

Это в основном короткодействующий потенциал притяжения типа Юкавы, обусловленный обменом π -мезонами. На очень малых расстояниях ($r < r_c \sim 0,5$ фм) притяжение переходит в отталкивание – кор (сердцевина). Можно сказать, что радиус кора является своеобразной границей между ядерной физикой и квантовой хромодинамикой, где существенной становится кварковая структура нуклонов и π -мезонов, да и само понятие нуклон-нуклонного потенциала теряет смысл.

13.6.2. Ядерные оболочки

Из-за сильного взаимодействия между нуклонами можно говорить о состояниях всего ядра в целом, а не о состояниях отдельных нуклонов. Однако для объяснения многих свойств ядер очень полезным приближением оказалась так называемая *оболочечная модель ядра*, в которой состояния ядра описываются через одночастичные состояния отдельных нуклонов, которые движутся в среднем поле, создаваемом всеми остальными нуклонами. Такое поле напоминает самосогласованное поле, действующее на электрон в атоме, однако в атоме основной вклад в среднее поле вносит само атомное ядро. Из-за большой массы ядра, по сравнению с массой электронов, положение ядра можно считать фиксированным, а самосогласованное поле определенным в пространстве. Кроме того, в достаточно тяжелых атомах с хорошей точностью можно пренебречь остаточными взаимодействиями между электронами и считать их независимо движущимися в среднем поле. Действительно, поскольку в этом случае основная часть взаимодействия между электронами учтена в среднем поле, то в нем будут двигаться почти независимые, но уже не электроны, а некие квазиэлектроны, между которыми действуют лишь малые остаточные взаимодействия. Ими в большинстве случаев можно пренебречь.

Для короткодействующих же ядерных сил при отсутствии выделенного центра эту модель трудно обосновать, поскольку невозможно свести все парные силы между нуклонами к среднему полю, в котором движутся независимые нуклоны. Строго говоря, это также уже будут не нуклоны, а некоторые почти невзаимодействующие между собой квазичастицы, причем роль остаточных взаимодействий (не учтенных в среднем поле) между этими квазичастицами может быть довольно велика.

Несмотря на эти трудности, такая модель независимых частиц благодаря своей простоте рассматривалась с начала развития ядерной физики. И причина в следующем. Как мы видели, в атомной физике очень сильно влияние заполнения электронных оболочек на свойства атомов, особенно это ярко проявляется в устойчивости заполненных оболочек благородных газов.

Аналогично, хотя и не столь выражено, проявляется особая устойчивость ядер, содержащих определенное число нейтронов, протонов или тех и других, что было замечено Бартлетом (1932) и Эльзассером (1933) практически сразу после открытия нейтрона (Чедвик, 1932) и появления идеи о протон-нейтронном строении ядра (Иваненко, Гейзенберг, 1932). Особую стабильность

α -частицы и ядер ^{12}C и ^{16}O можно заметить из рис. 12.2 при сравнении их энергий связи с энергиями связи соседних ядер; аналогичные, хотя и менее количественные аргументы указывают на особую стабильность ядер, для которых число нейтронов N или число протонов Z (или оба этих числа) имеют значения 2, 8, 20, 28, 50, 82 и 126.

Эти числа были названы *магическими*; проявление «магичности» можно обнаружить при тщательном исследовании разнообразных свойств ядер. В частности, число стабильных изотопов при данном значении Z является наибольшим для $Z = 50$ (изотопы олова), а число стабильных ядер, имеющих данное число нейтронов $N = A - Z$, является наибольшим при $N = 82$. Хотя абсолютная распространенность ядер в природе не полностью понята до сих пор, но распространенность таких элементов, как Zr (50 нейтронов), Sn (50 протонов), Ba (82 нейтрона) и Pb (82 протона, 126 нейтронов – дважды магическое ядро), выше соседних элементов. Энергия связи последнего нейтрона настолько мала в ^{87}Kr (51 нейтрон) и ^{137}Xe (83 нейтрона), что эти ядра, образуясь при β -распаде радиоактивных продуктов деления ядра урана, испускают нейтроны из возбужденных состояний и являются двумя наиболее известными излучателями так называемых *запаздывающих нейтронов* среди продуктов деления.

У. Эльзассер попытался понять стабильность магических ядер, предполагая, что нуклоны, подобно электронам в атоме, движутся независимо друг от друга в потенциальной яме. Однако он смог объяснить только три первых магических числа: 2, 8 и 20. И только в 1949 г. (М. Гепперт-Майер, И. Йенсен) была найдена специальная схема, которая сделала модель независимых частиц столь успешной, что с ее помощью оказалось возможным предсказывать большинство свойств нескольких первых состояний почти для каждого ядра.

13.6.2. Средний потенциал взаимодействия нуклона с ядром

При низких энергиях относительного движения нуклонов кор можно не учитывать и аппроксимировать нуклон-нуклонный потенциал только феноменологическим короткодействующим притягивающим взаимодействием $v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. Тогда можно ввести средний потенциал взаимодействия нуклона с ядром по аналогии с электрическим потенциалом:

$$V(\mathbf{r}) = \int v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')d^3r', \quad (13.50)$$

где $\rho(\mathbf{r})$ – распределение плотности нуклонов в ядре. Этот средний потенциал достаточно детально изучен экспериментально и хорошо аппроксимируется так называемым *феноменологическим потенциалом Вудса – Саксона* (рис. 13.4), который имеет вид

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_N}{a}\right)}, \quad (13.51)$$

где V_0 – глубина потенциала; $V_0 = 40\text{--}50$ МэВ (при $A > 100$), $V_0 = 30\text{--}40$ МэВ (если $A = 40\text{--}100$) и $V_0 = 20\text{--}30$ МэВ ($A < 40$); a – параметр диффузности (ширина границы ямы).

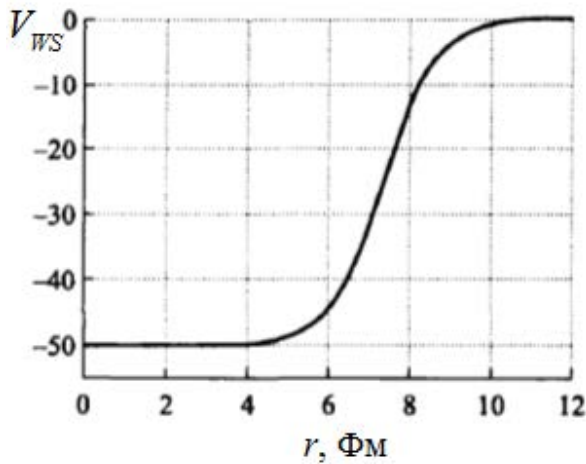


Рис. 13.4. Потенциал Вудса – Саксона для ядра с массовым числом $A = 208$ при $a = 0,65$ Фм, $R_A = 7,1$ Фм

В силу короткодействия нуклон-нуклонного потенциала нуклон-ядерный потенциал практически повторяет (с обратным знаком) распределение плотности нуклонов в ядре (рис. 13.5).

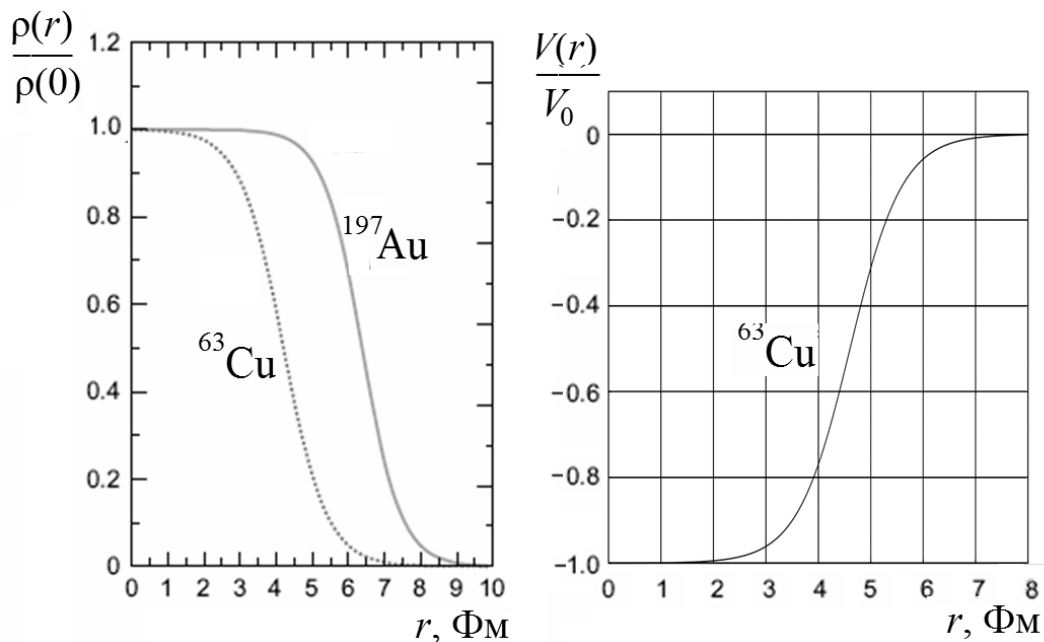


Рис. 13.5. Экспериментальное распределение плотности нуклонов в ядрах изотопов меди и золота (слева); потенциал Вудса – Саксона для ядра меди (справа)

В простейших оболочечных моделях сферических ядер потенциал $V(\mathbf{r})$ для легких ядер аппроксимируют потенциалом *трехмерного изотропного гармонического осциллятора* либо для тяжелых ядер *прямоугольной потенциальной ямой*.

Осцилляторный потенциал выбирается в виде

$$V_{\text{osc}}(r) = -V_0 + \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 r^2,$$

где V_0 – глубина ямы (рис.13.6); μ – приведенная масса нуклона и ядра; ω_0 – частота осциллятора. Радиус ядра при этом определяется из условия $V_{\text{osc}}(R_N) = -V_0 + \mu \omega_0^2 R_N^2 / 2 = 0$, т. е.

$$R_N = r_0 A^{1/3} = \frac{1}{\omega_0} \sqrt{\frac{2V_0}{\mu}},$$

так что

$$\hbar \omega_0 = A^{-1/3} \frac{\hbar c}{r_0} \sqrt{\frac{2V_0}{\mu c^2}} = A^{-1/3} \sqrt{\frac{2V_0}{\mu c^2}} \cdot 164,5 \text{ МэВ}.$$

При $V_0 \approx 30$ МэВ – $\hbar \omega_0 \approx 41 \cdot A^{-1/3}$ МэВ, при $V_0 \approx 50$ МэВ – $\hbar \omega_0 \approx 54 \cdot A^{-1/3}$ МэВ.

При $A = 20$ $V_0 \approx 30$ МэВ, $\hbar \omega_0 \approx 15$ МэВ, при $A = 200$ $V_0 \approx 50$ МэВ, $\hbar \omega_0 \approx 9$ МэВ.

Как мы видели, для трехмерного осциллятора спектр энергетических уровней эквидистантный и определяется главным квантовым числом Λ :

$$E_\Lambda = \hbar \omega_0 (\Lambda + 3/2),$$

где $\Lambda = 2n + l$; n и l – радиальное и орбитальное квантовые числа.

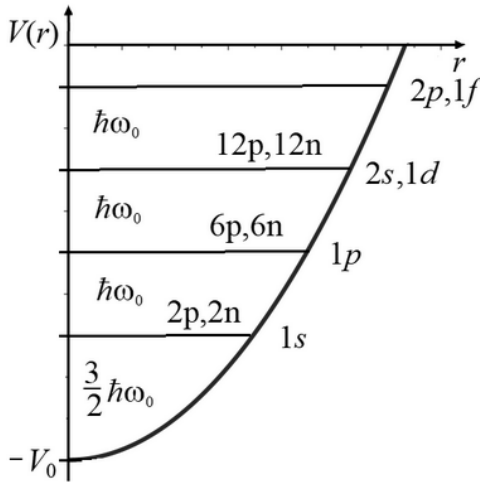


Рис. 13.6. Потенциал и уровни трехмерного изотропного осциллятора для ядра с $A \approx 150$, $V_0 = 50$ МэВ, $\hbar \omega_0 \approx 10$ МэВ

Степень вырождения уровней определяется (см. соотношение (11.117) и табл. 11.1) выражением

$$w_\Lambda = \frac{(\Lambda + 2)(\Lambda + 1)}{2}. \quad (13.52)$$

Кроме того, поскольку нуклоны обладают спином $1/2$, добавляется вырождение по двум проекциям спина нуклона и в силу зарядовой независимости ядерных сил по двум зарядам нуклона (это есть основание приписать нуклону еще и так называемый *изоспин*, равный $1/2$, с проекциями $\pm 1/2$), так что суммарная степень вырождения учетверяется. В результате, согласно принципу Паули, на каждом

уровне с квантовыми числами nlm (m – проекция орбитального момента) могут располагаться четыре нуклона: два протона и два нейтрона с противоположно направленными проекциями спинов. Однако, поскольку между протонами действуют кулоновские силы отталкивания, для них средний потенциал является менее глубоким по сравнению с нейтронным. Поэтому вырождение по проекциям изоспина снимается кулоновским полем, а протоны и нейтроны рассматриваются независимо в своих несколько отличающихся потенциалах (рис. 13.7). На этом рисунке показаны полностью заполненные нейтронная и протонная оболочки дважды магического ядра ^{16}O в приближении осцилляторного потенциала.

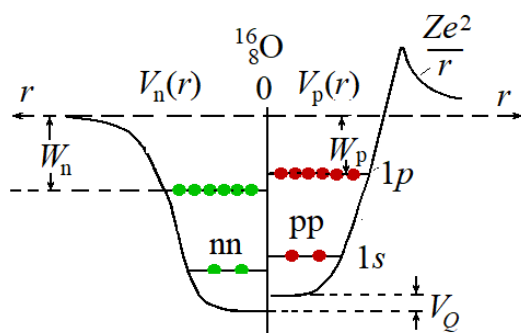


Рис. 13.7. Схематическое изображение потенциалов для протонов и нейтронов и размещение их по оболочкам для дважды магического ядра ^{16}O . Полностью заполнены две нижние оболочки. Вырождение уровней и их заполнение показано в приближении осцилляторных потенциалов

В соответствии с рис. 13.6. на уровне $1s$ размещены два протона и два нейтрона, а на уровне $1p$ – по шесть протонов и нейтронов. Таким образом, заполнением оболочек объясняются магические числа 2 и 8. На самом деле потенциал ядра отличается от осцилляторного, поэтому следующие более высокие уровни расщепляются по l , поскольку нуклоны в состояниях с разными l концентрируются на разных расстояниях от центра и находятся в потенциалах, по-разному отличающихся от осцилляторного.

Это расщепление, однако, существенно меньше расстояния между уровнями, так что сохраняется оболочечная структура уровней. Ядерные оболочки поэтому обозначают по уровням гармонического осциллятора: $1s$ -оболочка, $1p$ -оболочка, $1d2s$ -оболочка и т. д. *Подоболочками* называют одночастичные уровни, входящие в состав оболочек, например $1d$ - или $2s$ -подоболочки (рис. 13.8).

На этом рисунке для сравнения приведены уровни для потенциалов гармонического осциллятора, прямоугольной ямы и промежуточного варианта типа Вудса – Саксона. Числа в квадратных скобках, казалось бы, и должны быть магическими, однако, как видим, только первые три из них совпадают с экспериментальными (которые равны 2, 8, 20, 28, 50, 82 и 126), причем независимо от вида среднего потенциала. Весь набор магических чисел удалось объяснить Марии Гепперт-Майер и Йоханнесу Йенсену (см., например, работы [50, 51]) путем добавления к среднему потенциалу так называемого *спин-орбитального взаимодействия*, о котором речь пойдет ниже.

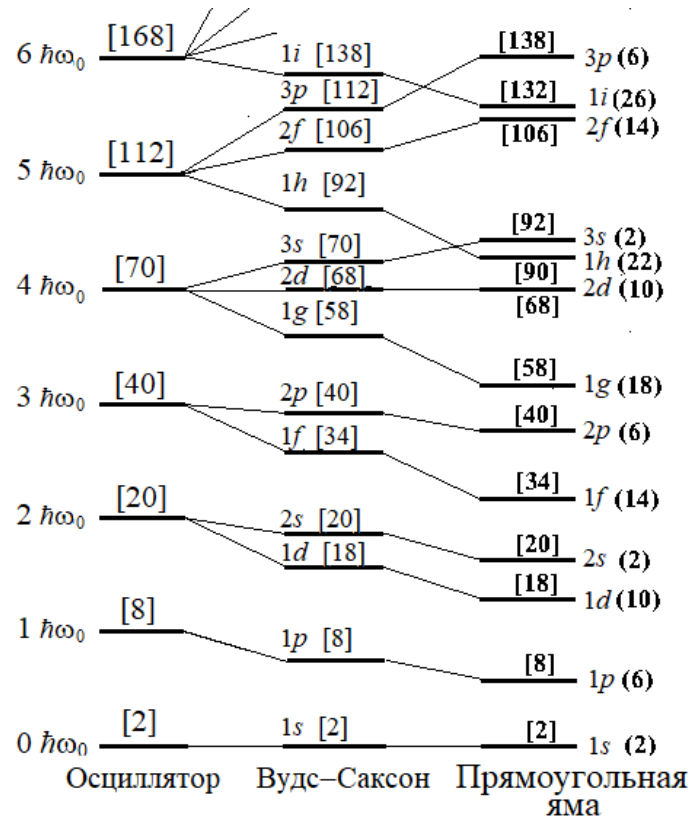


Рис. 13.8. Энергетические уровни для потенциалов гармонического осциллятора, Вудса – Саксона и прямоугольной ямы. В *квадратных скобках* приведено полное число протонов или нейтронов на всех полностью заполненных оболочках, включая данную; в *круглых* – кратность вырождения уровня с данным l , равное $2(2l + 1)$, т. е. число нуклонов определенного типа в данной заполненной подоболочке

13.6.3. Спин-орбитальное взаимодействие в атоме

Вид оператора спин-орбитального взаимодействия, как мы отмечали (см. равенство (5.76)), может быть найден из самых общих соображений. Этот оператор в нерелятивистской теории должен быть скалярной величиной, инвариантной относительно вращений и пространственных отражений, составленной из операторов, характеризующих движение частицы в потенциальном поле, т. е. спина $\mathbf{s}$, импульса $\mathbf{p}$ и скалярной потенциальной энергии $V(r)$. Поскольку $\mathbf{p}$ – полярный вектор, а $\mathbf{s}$ – аксиальный вектор, то единственным возможным скаляром будет скалярное произведение двух аксиальных векторов: $\mathbf{s}$ и векторного произведения полярных векторов $(\text{grad } V) \times \mathbf{p}$:

$$V_{\text{so}} = B \hat{\mathbf{s}} \cdot [(\text{grad } V) \times \hat{\mathbf{p}}].$$

Учитывая, что в центрально-симметричном поле

$$\text{grad } V = \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{\partial V}{\partial r},$$

получаем

$$V_{\text{so}} = B \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \hat{\mathbf{s}} [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = B \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \hat{\mathbf{s}} \hat{\mathbf{L}}, \quad (13.53)$$

где $\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]$ – оператор орбитального момента; $\hat{\mathbf{s}} = \hbar \boldsymbol{\sigma} / 2$ – спинового момента.

Следует заметить, что в формулу (13.53) входит истинная потенциальная энергия взаимодействия данного нуклона со всеми остальными нуклонами, а не усредненная типа (13.51), которая плавно зависит от r .

Такое спин-орбитальное взаимодействие для электрона в центрально-симметричном электростатическом поле появляется как релятивистская поправка, связанная с движением электрона в этом поле.

Действительно, при движении в кулоновском поле напряженности $\mathbf{E}$ со скоростью $\mathbf{v}$ в системе отсчета, связанной с электроном, на электрон действует магнитное поле, индукция которого в первом порядке по v/c равна $\mathbf{B} = [\mathbf{E} \times \mathbf{v}]/c$. Выражая напряженность электрического поля $\mathbf{E}$ через градиент потенциала $\phi(r)$, можем записать

$$\mathbf{E} = -\text{grad } \phi = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r}.$$

Таким образом, индукция магнитного поля для электрона –

$$\mathbf{B} = \frac{[\mathbf{E} \times \mathbf{v}]}{c} = -\frac{1}{mc} \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = -\frac{1}{mc} \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} \mathbf{M} \equiv -\frac{\hbar}{mc} \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} \mathbf{L}, \quad (13.54)$$

где $\mathbf{M} = \hbar \mathbf{L}$ – орбитальный момент количества движения электрона. Поскольку электрон обладает собственным магнитным моментом, связанным со спином и зарядом (см. соотношение (10.127)),

$$\boldsymbol{\mu}_e = g_e \mathbf{s} = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} = -\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}, \quad \left(\mathbf{s} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \right), \quad (13.55)$$

где e – абсолютная величина заряда электрона, то и возникает дополнительное взаимодействие его магнитного момента с магнитным полем (13.54). Это и есть спин-орбитальное взаимодействие, его оператор для электрона принимает вид

$$V_{\text{so}}^E = -\boldsymbol{\mu}_e \mathbf{B} = -\frac{e\hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{L}} = -\frac{e\hbar^2}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} \hat{\mathbf{s}} \hat{\mathbf{L}}. \quad (13.56a)$$

Однако существует еще одна релятивистская поправка Томаса (томасовская половинка), которая уменьшает энергию взаимодействия (13.56a) вдвое. Она следует из релятивистской теории Дирака для заряженных частиц со спином $1/2$. Так что окончательно выражение для энергии спин-орбитального взаимодействия электрона имеет вид

$$V_{\text{SO}}^E = -\frac{e\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{L}} = -\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \hat{\mathbf{s}} \hat{\mathbf{L}}, \quad (13.56б)$$

(знак «минус» здесь соответствует отрицательному знаку заряда электрона).

Таким взаимодействием в теории атома объясняется наблюдаемая в оптических спектрах атомов так называемая *тонкая структура спектральных линий* и, соответственно, тонкая структура атомных уровней, когда каждый уровень с $l \neq 0$ расщепляется на два со спинами, направленными по или против орбитального момента $\mathbf{L}$. Действительно, вводя полный момент электрона в состоянии с заданным l , как $\mathbf{j} = \mathbf{s} + \mathbf{L}$, для оператора квадрата полного момента будем иметь $\mathbf{j}^2 = \mathbf{s}^2 + \mathbf{L}^2 + 2(\mathbf{sL})$, откуда для оператора скалярного произведения –

$$2(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{L}}) = \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2.$$

Переходя к собственным значениям этого оператора в состоянии с заданным j, l и $s = 1/2$, получаем

$$2(\mathbf{sL}) = j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} l, & j = l + 1/2 \\ -(l+1), & j = l - 1/2. \end{cases} \quad (13.57)$$

Полный момент электрона в атоме может принимать два значения $j = l \pm 1/2$, так что средние значения спин-орбитального взаимодействия в состояниях с заданным l и разными j (смещения подуровней с разными j относительно невозмущенного положения) будут

$$\Delta E_{\pm}^E = \langle j_{\pm} | V_{\text{SO}}^E | j_{\pm} \rangle = \begin{cases} -A_E l, & j = l + 1/2 \equiv j_+, \\ A_E (l+1), & j = l - 1/2 \equiv j_-, \end{cases} \quad (13.58)$$

где

$$A_E = \left\langle \frac{e\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right\rangle = \frac{e^2}{4\hbar c} \left\langle \frac{\lambda_{ce}^3}{r^3} \right\rangle \text{ для } \varphi = -\frac{e}{r}. \quad (13.59)$$

Таким образом, происходит так называемое *тонкое расщепление* уровня с заданным l на два подуровня с разными j (снимается вырождение по полному моменту электрона), величина этого расщепления

$$\Delta E^E = |\Delta E_+^E - \Delta E_-^E| = A_E (2l+1). \quad (13.60)$$

В физике атома его величину можно рассчитать. Она с очень хорошей точностью совпадает с наблюдаемой, и гораздо меньше расстояний между оболочками, поэтому расщепление и называется *тонким*, а константа $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$, характеризующая величину A_E , получила название *постоянной тонкой структуры*.

С учетом тонкого расщепления состояния с определенной энергией, определенным орбитальным моментом l и полным моментом j (и соответствующие оболочки и подоболочки) будут обозначаться как nlj , т. е., например, $1s_{1/2}$; $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$; $3s_{1/2}$, $3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$, $3d_{3/2}$, $3d_{5/2}$ и т. д.

13.6.3. Спин-орбитальное взаимодействие нуклонов в ядре

Итак, выше мы убедились, что выбор более реальной радиальной зависимости для потенциала среднего поля (по сравнению с осцилляторным потенциалом) не привел к правильным числам заполнения оболочек (магическим числам). Следовательно, нужно ввести такое дополнительное взаимодействие, которое расщепило бы вырожденные состояния гармонического осциллятора. Поэтому при построении оболочечной модели ядра было сделано предположение о существовании достаточно сильного спин-орбитального взаимодействия для нуклонов в ядре вида (13.53)

$$V_{SO}^N = \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \hat{\mathbf{s}} [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \hat{\mathbf{s}} \hat{\mathbf{L}}. \quad (13.61)$$

Константу B из равенства (13.53) мы отнесли к потенциалу V взаимодействия нуклона с остальными нуклонами ядра. В результате получаем сдвиги ядерных уровней, аналогичные выражению (13.58):

$$\Delta E_{\pm}^N = \langle j_{\pm} | V_{SO}^N | j_{\pm} \rangle = \begin{cases} A_N l, & j = l + 1/2 \equiv j_+, \\ -A_N (l + 1), & j = l - 1/2 \equiv j_-, \end{cases} \quad (13.62)$$

где

$$A_N = \left\langle \frac{1}{2r} \frac{\partial V}{\partial r} \right\rangle. \quad (13.63)$$

Величина расщепления $\Delta E^N = A_N (2l + 1)$.

Поскольку явный вид потенциала $V(r)$ неизвестен, величину A_N приходится подбирать из экспериментальных данных. Наблюдаемые расщепления состояний с данными l и $j = l \pm 1/2$ показывают, что величина энергии расщепления по порядку величины (см., например, работу [51])

$$\Delta E^N = \Delta E_+^N - \Delta E_-^N = A_N (2l + 1) \approx -10 A^{-2/3} (2l + 1) \text{ МэВ}. \quad (13.64)$$

Это выражение имеет следующий простой физический смысл: радиальная производная потенциала в выражении (3.63) отлична от нуля (имеет резкий максимум) только вблизи границы ядра, поэтому среднее (3.63) определяется радиальной плотностью нуклонов на его поверхности, а эта плотность обратно пропорциональна площади поверхности ядра, т. е. $\sim A^{-2/3}$.

Изменение энергетического спектра после введения спин-орбитального взаимодействия показано на рис. 13.9. Поскольку спин-орбитальное расщепление для состояний с большими орбитальными моментами l может быть сравнимо с расстояниями между оболочками (рис. 13.9), то оно играет существенную роль при формировании оболочек. Предположение о существовании сравнительно большой спин-орбитальной части в потенциале среднего поля подтверждено большим числом экспериментальных фактов. К ним относится, например, расщепление уровней с данным l по полному моменту $j = l \pm 1/2$, что осо-

бенно четко проявляется у ядер, у которых имеется один нуклон сверх замкнутой оболочки.

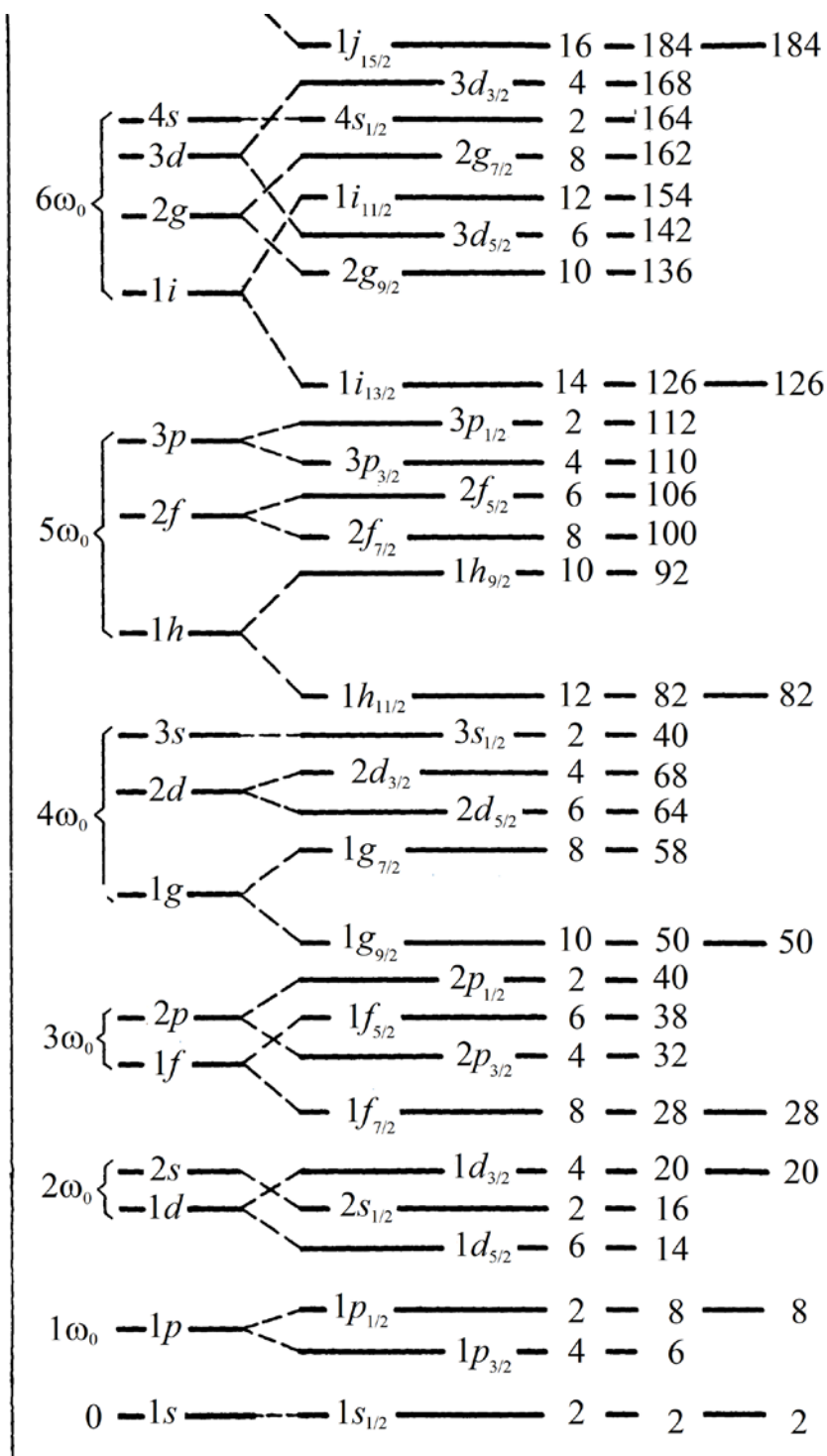


Рис. 13.9. Схема одночастичных уровней со спин-орбитальным взаимодействием. Слева даны схемы уровней для потенциалов гармонического осциллятора и Вудса – Саксона без V_{SO} ; затем – со спин-орбитальным расщеплением; числа справа – сначала приведены числа нейтронов (протонов) в подоболочках, затем – полное число частиц со дна ямы до данной подоболочки включительно и, наконец, числа заполнения оболочек (магические числа)

Из рисунка 13.9 видно, что после введения спин-орбитальной части в потенциал среднего поля структура первых трех оболочек с малыми l практически не меняется, поэтому первые три магических числа остаются неизменными, для более высоких оболочек числа их заполнения существенно изменяются. В результате получается весь набор магических чисел: 2, 8, 20, 28, 50, 82 и 126, совпадающий с наблюдаемым. Здесь мы используем термин *оболочка* для совокупности близких состояний, расположенных между магическими числами (которые разделены достаточно большими интервалами), и *подоболочка* – для обозначения вырожденных по проекциям полного момента состояний внутри оболочки, характеризуемых числами nlj . Например, четвертая оболочка, расположенная между числами нейтронов (протонов) от 50 до 82, состоит из следующих подоболочек: $1g_{7/2}$, $2d_{5/2}$, $2d_{3/2}$, $3s_{1/2}$, $1h_{11/2}$. Следует отметить, что в гармоническом потенциале со спин-орбитальной частью оболочки определены однозначно. Однако порядок расположения подоболочек внутри оболочки неоднозначен и зависит от константы спин-орбитального взаимодействия.

Мария Гепперт-Майер и Иоганнес Йенсен за объяснение магических чисел были удостоены Нобелевской премии по физике (1963) с формулировкой: «за открытия, касающиеся оболочечной структуры ядра», которую они разделили с Юджином Вигнером. Он получил вторую половину премии «за вклад в теорию атомного ядра и элементарных частиц, особенно с помощью открытия и применения фундаментальных принципов симметрии».

13.7. Электроны в кристаллической решетке. Одномерный случай

Наше понимание поведения электронов в кристаллических решетках значительно продвинулось вперед благодаря идее Ф. Блоха [28], которая основана на предположении, что взаимодействие данного электрона с другими частицами кристалла в первом приближении может быть заменено периодическим потенциальным полем. Рассмотрим, например, одномерную линейную цепочку из N атомов. Потенциал этой цепочки для электрона можно приближенно представить в виде, изображенном на рис. 13.10а. Более упрощенная картинка изображена на рис. 13.10б, где потенциальные ямы заменены промежутками свободного движения, разделенными барьерами. В каждой яме (или промежутке между барьерами) может находиться электрон в связанном состоянии с энергией E . Таких состояний ровно N по числу ям. В них можно разместить N электронов с энергией E , т. е. одночастичное состояние с энергией E в такой цепочке является N -кратно вырожденным (если барьеры между ямами абсолютно непроницаемы). Сближение потенциальных ям приводит к туннельному перемещению электрона между ямами и вызывает расщепление каждого энергетического уровня (если их в яме несколько) одиночной ямы на N подуровней. Множество подуровней называется *зоной*.

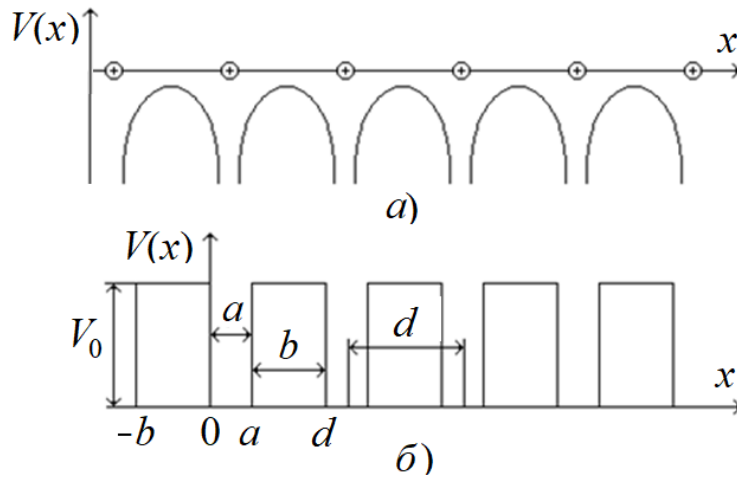


Рис. 13.10. Замена реалистичного периодического потенциала: a – цепочкой прямоугольных ям; b – шириной a , разделенных барьерами шириной b и высотой V_0

Зонная теория кристаллов лежит в основе современной физики твердого тела. Ее принципы были заложены в работах Феликса Блоха, Леона Бриллюэна и Рудольфа Пайерлса [28, 52, 53] в 1928–1930 гг. Задачу о движении электрона в прямоугольном периодическом потенциале (см. рис. 13.10б), моделирующем кристаллическую решетку, решили в 1931 г. Ральф де Крониг и Вильям Георг Пенни [54]. Эта одномерная модель кристалла (*модель Кронига – Пенни*) оказалась очень полезной для понимания сути квантовой (зонной) теории твердого тела.

13.7.1. Модель Кронига – Пенни

Теорема Блоха позволяет при некоторых упрощающих предположениях аналитически решить задачу об электроне в периодическом поле кристаллической решетки. Основная трудность в решении уравнения Шредингера связана с невозможностью точно записать вид функции потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$. Поэтому часто периодическую зависимость функции $V(\mathbf{r})$ заменяют более простой функцией с точно таким же периодом.

В модели Кронига – Пенни ограничиваются рассмотрением одномерной задачи (цепочки атомов), в которой периодический потенциал заменяется цепочкой прямоугольных потенциальных ям (см. рис. 13.10б). Ширина каждой ямы – a , они отделены друг от друга прямоугольными потенциальными барьерами высотой V_0 и шириной b . Период повторения ям $d = a + b$. Мы же, следуя работе [55], еще более упростим задачу: устремим высоту барьера к бесконечности, а его ширину – к нулю, оставив конечным произведение $V_0 b$, т. е. площадь барьера. Тем самым мы получили одномерную решетку с периодом $d = a$, в узлах которой находятся δ -образные барьеры для электрона (рис. 13.11). Потенциальную энергию такой бесконечной решетки можно записать в виде, аналогичном (3.49),

$$V(x) = G \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nd) \equiv \beta \frac{\hbar^2}{md} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nd) = \beta \frac{\hbar^2}{md^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{x}{d} - n\right). \quad (13.65)$$

Здесь $G = V_0 b$, $\hbar^2/(md^2)$ – параметр с размерностью энергии (имеет порядок энергии основного состояния в ящике с непроницаемыми стенками размером d , в частности для электрона в кристалле с $d \sim 10^{-8}$ см $\hbar^2/(md^2) = (\lambda_{ce}/2\pi d)^2 mc^2 \sim 7$ эВ); β – безразмерный параметр, характеризующий степень непроницаемости барьера: $\beta = 0$ – барьер отсутствует (абсолютная проницаемость) и $\beta = \infty$ – абсолютная непроницаемость барьера; m – масса свободного электрона; d – постоянная решетки.

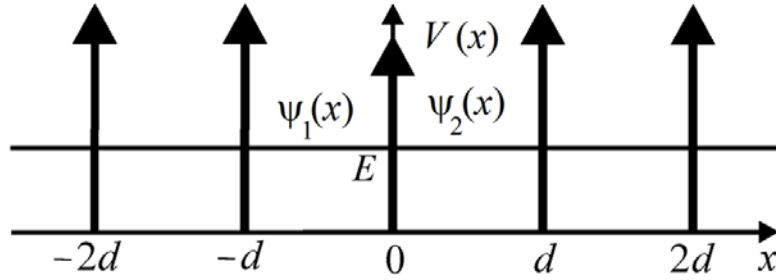


Рис. 13.11. Одномерная решетка из δ -функций

Стационарное уравнение Шредингера запишем в виде

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0 \quad (13.66)$$

или, если ввести волновой вектор k по формуле $E = \hbar^2 k^2 / 2m$,

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \left[k^2 - \frac{2\beta}{d} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nd) \right] \psi(x) = 0. \quad (13.67)$$

Исходя из теоремы Блоха (5.57), решение ищем в виде бегущей волны $\exp(iqx)$, модулированной периодической с периодом d функцией $f(x)$:

$$\psi(x) = f(x) e^{iqx}, \quad (13.68)$$

$f(x) = f(x + Nd)$. Из равенства (13.68) имеем

$$\begin{aligned} \psi(x + Nd) &= f(x) e^{iqx} e^{iqNd} = e^{iqNd} \psi(x), \\ |\psi(x + Nd)|^2 &= |\psi(x)|^2. \end{aligned} \quad (13.69)$$

Таким образом, электрон обнаруживается в пределах каждого периода решетки с одинаковой плотностью вероятности.

В интервале $0 < x < d$ уравнение (13.67) имеет вид

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0, \quad (13.70)$$

его общее решение –

$$\psi_2(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}. \quad (13.71)$$

Для $-d < x < 0$ находим $\psi_1(x)$ с помощью равенств (13.69), полагая $N = 1$:

$$\begin{aligned} \psi_2(x+d) &= e^{iqd} \psi_1(x), \\ \psi_1(x) &= e^{-iqd} \psi_2(x+d) = e^{-iqd} (c_1 e^{ik(x+d)} + c_2 e^{-ik(x+d)}). \end{aligned} \quad (13.72)$$

Сшиваем $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ в точке $x = 0$. Условие непрерывности волновой функции $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ дает

$$c_1 + c_2 = e^{-iqd} (c_1 e^{ikd} + c_2 e^{-ikd}). \quad (13.73)$$

Производная в точке $x = 0$ терпит скачок, определяемый выражением (3.5):

$$\psi'(+\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = \frac{2mG}{\hbar^2} \psi(0) = \frac{2\beta}{d} \psi(0) \quad (13.74)$$

или

$$\psi'_2(0) - \psi'_1(0) = \frac{2\beta}{d} \psi(0), \quad (13.75)$$

откуда получаем

$$ik \left[(c_1 - c_2) - e^{-iqd} (c_1 e^{ikd} - c_2 e^{-ikd}) \right] = \frac{2\beta}{d} (c_1 + c_2). \quad (13.76)$$

В результате мы имеем систему двух линейных однородных уравнений для нахождения амплитуд c_1 и c_2 , которую перепишем в виде

$$\begin{aligned} (1 - e^{i(k-q)d}) c_1 + (1 - e^{-i(k+q)d}) c_2 &= 0, \\ \left(1 - e^{i(k-q)d} + \frac{2i\beta}{kd} \right) c_1 - \left(1 - e^{-i(k+q)d} - \frac{2i\beta}{kd} \right) c_2 &= 0. \end{aligned} \quad (13.77)$$

Условием разрешимости этой системы является равенство нулю ее определителя:

$$(1 - e^{i(k-q)d}) \left(1 - e^{-i(k+q)d} - \frac{2i\beta}{kd} \right) + (1 - e^{-i(k+q)d}) \left(1 - e^{i(k-q)d} + \frac{2i\beta}{kd} \right) = 0$$

или

$$\begin{aligned} 1 - e^{i(k-q)d} - e^{-i(k+q)d} + e^{-2iqd} - \frac{2i\beta}{kd} + \frac{2i\beta}{kd} e^{i(k-q)d} + \\ + 1 - e^{-i(k+q)d} - e^{i(k-q)d} + e^{-2iqd} + \frac{2i\beta}{kd} - \frac{2i\beta}{kd} e^{-i(k+q)d} = 0, \end{aligned}$$

откуда следует

$$e^{iqd} - e^{ikd} + e^{-ikd} - e^{-iqd} - \frac{2\beta}{kd} \sin kd = 0$$

и окончательно

$$\cos qd = \cos kd + \frac{\beta}{kd} \sin kd. \quad (13.78)$$

В результате получили дисперсионное соотношение, которое связывает энергию электрона в кристалле $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ с его квазиимпульсом $\hbar q$, который для бесконечной цепочки принимает непрерывные значения. Это есть трансцендентное уравнение для нахождения величины kd , определяющей энергию электрона по заданному qd .

Левая часть соотношения (13.78) ограничена $|\cos qd| \leq 1$, тогда правая сторона должна удовлетворять неравенству

$$\left| \cos kd + \frac{\beta}{kd} \sin kd \right| \leq 1. \quad (13.79)$$

Области значений kd , удовлетворяющие неравенству (13.79), называются *разрешенными зонами* с номерами $n = 1, 2, \dots$ и обозначены отрезками жирной линии на рис. 13.12. Между ними находятся запрещенные зоны. В разрешенных областях уравнение (13.78) имеет решения. На рисунке 13.12 изображена функция $F(kd)$, представляющая правую часть этого уравнения при $\beta = 7$, пересекаемая прямыми $F(kd) = \pm 1$.

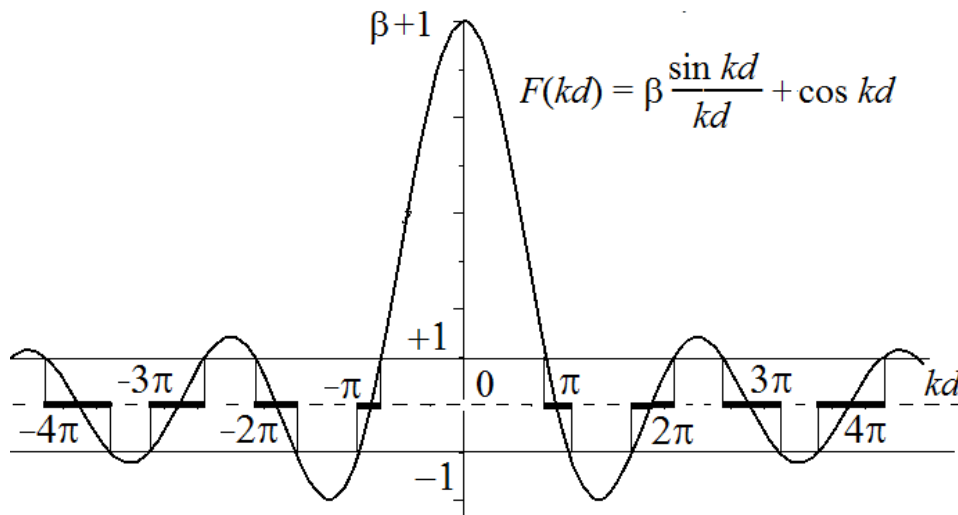


Рис. 13.12. Разрешенные области значений kd (разрешенные энергетические зоны), при которых удовлетворяется уравнение (13.78), лежат на оси kd (отрезки жирной линии) между точками пересечения кривой $F(kd)$ прямыми линиями на расстоянии ± 1 от оси абсцисс

При увеличении k (т. е. энергии частицы) ширина разрешенных зон (по k или по энергии) увеличивается, а запрещенных – сужается. Ширины разрешенных зон по величине k становятся одинаковыми и равными $\Delta k = \pi/d$ (расстояние

между соседними точками, в которых $\cos kd = \pm 1$), ширины же запрещенных зон стремятся к нулю.

Для конечной цепочки длиной $L = Nd$ из N атомов нужно определить граничные условия на ее границах. Как мы уже отмечали, для большой длины цепочки они мало влияют на внутреннее решение, поэтому обычно используют условие цикличности (условие Борна – Кармана (2.56)), которое в нашем случае выглядит так:

$$\psi(x + L) = \psi(x) \text{ или } e^{iq(x+L)} = e^{iqx}, \quad (13.80)$$

которое выполняется при $qL = qNd = 2\pi n$, где n – целые числа.

Таким образом, в конечной цепочке q принимают дискретные значения $q = 2\pi n/Nd$ и разница между ближайшими значениями равна $\Delta q = 2\pi/Nd$, поэтому каждая разрешенная зона имеет квазинепрерывный спектр, обусловленный конечной протяженностью кристалла (при $L \sim 1$ мм расстояние между уровнями $\Delta E \sim 10^{-20}$ эВ), который содержит N дискретных (близко расположенных) подуровней, отвечающих разным q и, соответственно, k .

Устремление $L = Nd$ к бесконечности приводит к непрерывному спектру q , в этом случае и допустимые значения kd (а следовательно, и энергий E) непрерывно заполняют участки оси kd , изображенные жирными линиями. Таким образом, энергетический спектр электронов, движущихся в периодической решетке, имеет зонную структуру. Он состоит из непрерывных разрешенных зон, разделенных конечными интервалами (запрещенными зонами).

Спрашивается, как влияет величина β на этот спектр. Если β устремить к нулю, то кривая на рис. 13.12 переходит в $\cos ka$, решением является $k = q$, запрещенные интервалы исчезают, и мы имеем единый непрерывный спектр всех значений энергии от 0 до ∞ , причем и полная энергия электрона определится как

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}.$$

Это предельный случай свободных электронов.

Увеличение β приводит к появлению запрещенных энергетических зон, однако отношение ширины этих зон к ширине соседних разрешенных участков уменьшается с ростом kd (т. е. энергии электрона). В результате при $kd \gg \beta$ (приближение слабой связи) опять имеем практически свободный электрон. Можно сказать, что, поскольку быстрые электроны легче преодолевают потенциальные барьеры, чем медленные, они являются почти свободными.

Устремление β к бесконечности (приближение сильной связи) уменьшает разрешенные участки на оси kd до точек $kd = n\pi$ ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$). Энергетический спектр электронов становится дискретным со значениями энергии, равными

$$E_n^\infty = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2md^2}, \quad (13.81)$$

которые в точности совпадают с энергиями электрона, заключенного между двумя непроницаемыми потенциальными барьерами на расстоянии d друг от друга. Электрон зажат между потенциальными стенками, его движение финитно (он связан в отдельной яме), и его энергетический спектр дискретен.

Туннелирование сквозь барьеры в соседние ямы и приводит к возможности распространения электрона по всему кристаллу (т. е. инфинитному движению), в результате чего появляются зоны непрерывного спектра (для конечного кристалла квазинепрерывного).

Таким образом, при конечном значении β каждый дискретный уровень расщепляется на конечное число подуровней, равное числу потенциальных ям, которое равно числу N атомов, расположенных в узлах кристаллической решетки. Эти уровни образуют зону, которая при $N \rightarrow \infty$ превращается в зону непрерывного спектра.

Данное утверждение справедливо не только для линейной цепочки атомов, но и для общего случая пространственного кристалла. В кристалле точно так же каждый энергетический уровень изолированного атома превращается в зону N энергетических уровней кристалла (рис. 13.13). Заметим, что, в отличие от рассмотренного примера одномерной потенциальной цепочки, в трехмерном случае при уменьшении непроницаемости барьера (т. е., например, при сближении атомов) разрешенные зоны могут перекрываться, как указано на рис. 13.13, в одномерной же задаче они только сближаются (ширина запрещенной зоны стремится к нулю).

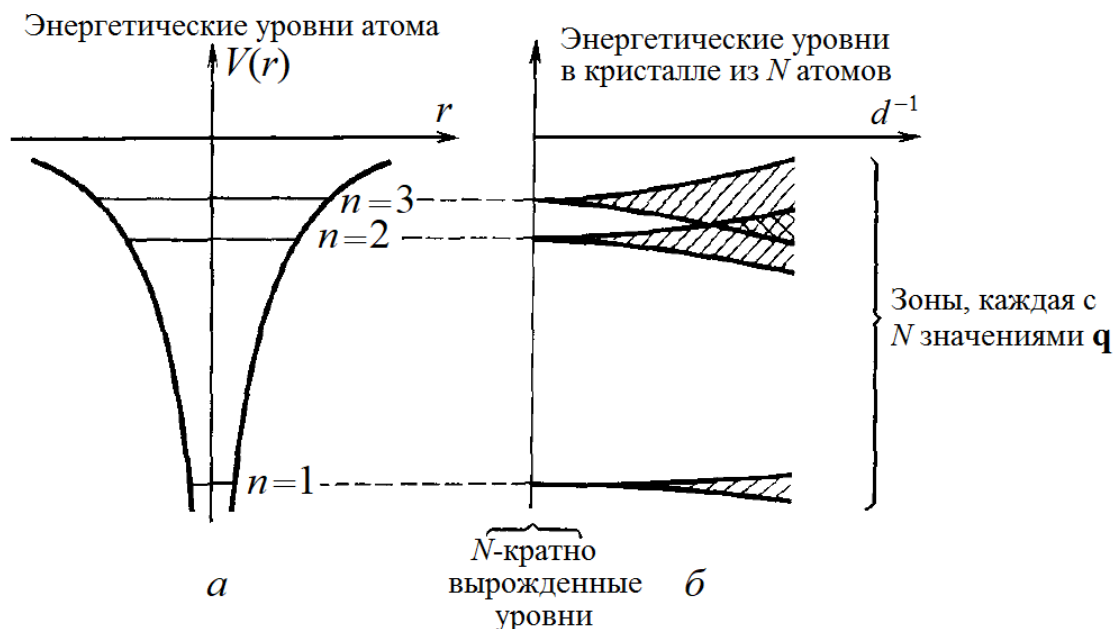


Рис. 13.13. Схематическое изображение невырожденных электронных уровней в атомном потенциале – a ; энергетические уровни для N атомов, образующих периодическую решетку, как функции обратного межатомного расстояния – b . Когда атомы расположены далеко друг от друга (барьеры почти непроницаемые, малые интегралы перекрытия волновых функций соседних атомов), уровни почти вырождены; если же атомы сближаются, проницаемость барьеров увеличивается (большие интегралы перекрытия) и уровни расширяются в зоны

13.7.2. Верхняя граница разрешенной зоны

Заметим, что из равенства (13.78) и рис. 13.12 следует, что с увеличением k переход от разрешенной к запрещенной зоне происходит при $\sin(k_n d) = 0$ (причем $k_n d \neq 0$) и $\cos(k_n d) = \pm 1$, т. е. при

$$k_n d = \pm n\pi, \quad n = 1, 2, 3... \quad (13.82)$$

Из выражения (13.78) следует, что $q d = k_n d + 2\pi m$, где m – целое число, т. е.

$$q = k_n + \frac{2\pi}{d} m = k_n + G, \quad (13.83)$$

где $G = 2\pi m/d$ – введенный ранее (см. формулу (9.35)) вектор обратной решетки.

Таким образом, квазиволновой вектор q (и квазиимпульс $\hbar q$) отличаются от обычного волнового вектора (и импульса) тем, что он определен с точностью до вектора обратной решетки, а это связано с тем, что периодическая решетка (неоднородная среда) может передавать и принимать импульс, кратный $2\pi\hbar/d$.

Тогда из равенств (13.82, 13.83) следует, что с точностью до $2\pi n/d$ волновое число k_n совпадает с квазиволновым числом q :

$$q = k_n = \frac{\pi}{d} n. \quad (13.84)$$

Выражаем волновое число (13.84) через длину волны де Бройля:

$$\frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{\pi}{d} n \text{ или } n\lambda_n = 2d. \quad (13.85)$$

Это есть не что иное, как условие Вульфа – Брэгга для максимума отраженной решеткой волны при угле Брэгга, равном 90° , т. е. при отражении назад. Действительно, если прямая волна имеет квазиволновой вектор q (см. равенство (13.84)), то отраженная будет обладать квазиволновым вектором:

$$q - G = \pi n/d - 2\pi n/d = -\pi n/d = -q.$$

Таким образом, на границе между разрешенной и запрещенной зонами мы имеем

$$|q - G| = |q|. \quad (13.86)$$

Это условие $2qG = G^2$, или $q = G/2$, в точности совпадает с условием (13.85). Оно означает, что прямая и отраженная волны имеют одинаковые энергии, а следовательно, полностью перемешиваются периодическим потенциалом, что и означает появление сильной отраженной волны. Образуются симметричная и антисимметричная комбинации прямой и отраженной волн вида

$$\begin{aligned}\psi_+ &\sim e^{iqx} + e^{-iqx} = 2 \cos qx = 2 \cos \frac{\pi nx}{d}, \\ \psi_- &\sim e^{iqx} - e^{-iqx} = 2i \sin qx = 2i \sin \frac{\pi nx}{d}.\end{aligned}\tag{13.87}$$

Следовательно, у верхней границы разрешенной зоны электрон, испытывая брэгговское отражение, не распространяется по кристаллу, поскольку в результате интерференции прямой и отраженной волн образуются стоячие волны (13.87), причем

$$\begin{aligned}|\psi_+|^2 &\sim \cos^2 \frac{\pi nx}{d} = \frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{2\pi nx}{d} \right), \\ |\psi_-|^2 &\sim \sin^2 \frac{\pi nx}{d} = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi nx}{d} \right).\end{aligned}\tag{13.88}$$

В симметричном (четном) состоянии электроны концентрируются вблизи ионов. Электростатическое притяжение электрона к иону понижает энергию системы по сравнению с равномерным распределением электронов. Аналогично в антисимметричном (нечетном) состоянии электроны концентрируются между ионами, энергия повышается. Это состояние принадлежит следующей разрешенной зоне. Между ними находится запрещенная зона.

13.7.3. Приближение сильной связи $\beta \gg 1$

При $\beta \gg 1$, согласно соотношению (13.79), величина kd несколько отличается от $n\pi$, и мы можем написать

$$\begin{aligned}k_n d &= n\pi + \varepsilon_n, \quad \varepsilon_n \ll 1, \\ \cos k_n d &\approx (-1)^n, \quad \sin k_n d = \sin(n\pi + \varepsilon_n) \approx (-1)^n \varepsilon_n.\end{aligned}\tag{13.89}$$

Тогда из уравнения дисперсии (13.78) будем иметь

$$\cos qd = (-1)^n + \frac{\beta}{n\pi} (-1)^n \varepsilon_n = (-1)^n \left(1 + \frac{\beta}{n\pi} \varepsilon_n \right)$$

и

$$\varepsilon_n = \frac{n\pi}{\beta} \left[(-1)^n \cos qd - 1 \right], \quad \beta \gg n\pi.\tag{13.90}$$

С другой стороны, учитываем

$$(k_n d)^2 \approx n^2 \pi^2 + 2\varepsilon_n n\pi = n^2 \pi^2 \left(1 - \frac{2}{\beta} + (-1)^n \frac{2}{\beta} \cos qd \right).\tag{13.91}$$

Используя связь $E_n = \hbar(k_n d)^2 / 2md^2$, находим связь энергии электрона с его квазиимпульсом:

$$E_n(qd) = E_n^\infty \left(1 - \frac{2}{\beta} + (-1)^n \frac{2}{\beta} \cos qd \right), \quad (13.92)$$

где, согласно равенству (13.81), $E_n^\infty = \hbar^2 n^2 \pi^2 / (2md^2)$.

Видим, что каждый n -й уровень с энергией E_n^∞ превращается в зону разрешенных энергий, соответствующих разным значениям q . В частности, для первой зоны ($n = 1$) имеем

$$E_1(qd) = E_1^\infty \left(1 - \frac{2}{\beta} [1 + \cos qd] \right) = E_1^\infty \left(1 - \frac{4}{\beta} \cos^2 \frac{qd}{2} \right). \quad (13.93)$$

Аналогичное выражение получается и для всех зон с нечетными номерами. Для второй разрешенной зоны ($n = 2$)

$$E_2(qd) = E_2^\infty \left(1 - \frac{2}{\beta} [1 - \cos qd] \right) = E_2^\infty \left(1 - \frac{4}{\beta} \sin^2 \frac{qd}{2} \right). \quad (13.94)$$

Графики дисперсионных кривых (13.93) и (13.94) для первых двух зон изображены на рис. 13.14 жирными сплошными линиями. Верхняя граница зоны $qd = \pm\pi$ касается параболы $E = \hbar^2(qd)^2 / 2md^2$, показанной пунктиром, где выполняется условие $q = k$. Из рисунка 13.14 и выражений (13.92–13.94) нетрудно видеть, что ширина n -й разрешенной зоны

$$\Delta E_n = E_n(\pi n) - E_n(\pi[n-1]) = \frac{4}{\beta} E_n^\infty. \quad (13.95)$$

Она тем меньше, чем больше степень непроницаемости барьера β .

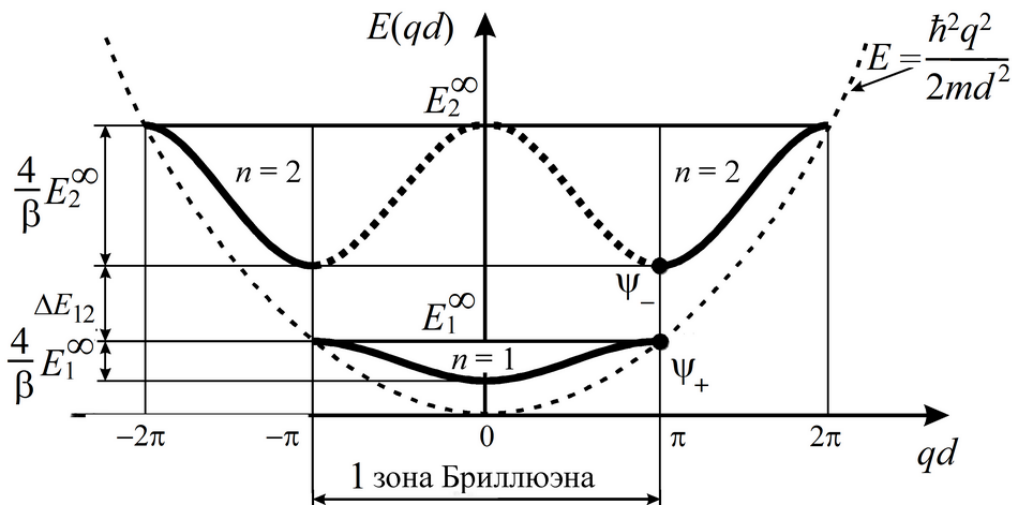


Рис. 13.14. Графики дисперсионных зависимостей для первых двух зон

Ширина запрещенной зоны, или энергетической щели (между n -й и $(n + 1)$ -й разрешенными зонами), равна

$$\Delta E_{n,n+1} = E_{n+1}(\pi n) - E_n(\pi n) = E_{n+1}^{\infty} - E_n^{\infty} - \frac{4}{\beta} E_{n+1}^{\infty}. \quad (13.96)$$

Она увеличивается как n при $n \gg 1$ (напомним, что $\beta \gg n\pi$).

Как мы уже отмечали, появление щели объясняется тем, что при $qd = \pi n$ возникают два типа стоячих волн разной симметрии с разными энергиями. Уровень, соответствующий исходной бегущей волне, расщепляется на два уровня с отличающимися энергиями, принадлежащих соседним разрешенным зонам.

Заметим, что замена

$$qd \rightarrow qd \pm 2\pi n$$

не изменяет энергию (13.92) и условие периодичности волновой функции (13.69). Передвигаем левую и правую ветви зоны 2 на рис. 13.14 соответственно на $\pm 2\pi$. Результат показан жирной пунктирной кривой. Первая и вторая зоны и аналогично другие зоны попадают в интервал $(-\pi \leq qd \leq \pi)$, называемый *первой зоной Бриллюэна*. Квазиимпульс достаточно рассматривать в пределах этой зоны (рис. 13.15) аналогично тому, как это было сделано для фононов.

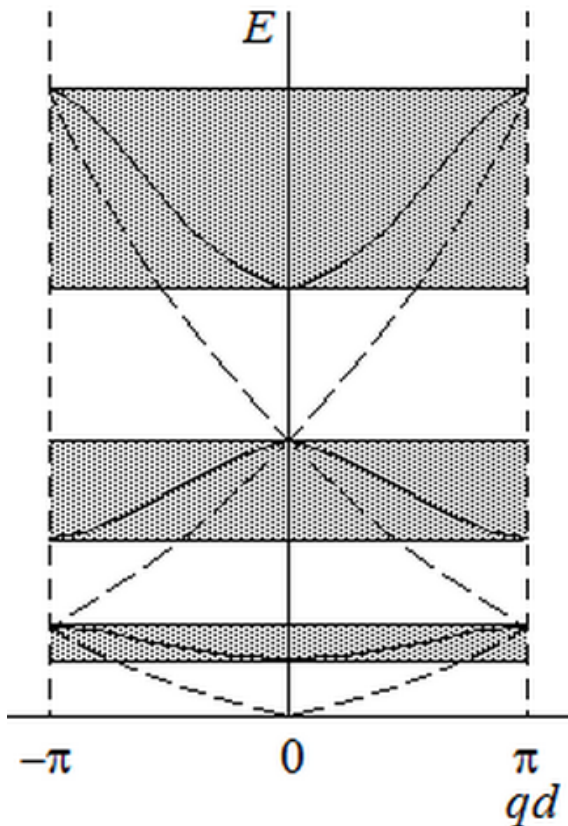


Рис. 13.15. Энергия электрона как функция квазиволнового числа qd в схеме приведенных зон Бриллюэна. Заштрихованы разрешенные области (зоны) энергий. Пунктирными линиями изображен параболический закон дисперсии для свободного электрона

13.7.4. Электрон в кристалле как квазичастица

Электрон характеризуется массой m , волновым числом k , импульсом $p = \hbar k$ и скоростью v . Электрон в кристалле можно рассматривать как квазичастицу с эффективной массой m^* , квазиволновым числом q , квазиимпульсом $P = \hbar q$, групповой скоростью V . Скорость квазичастицы и является групповой скоростью волны. Импульс электрона изменяется под действием поля решетки и внешнего поля. Квазиимпульс же изменяется только внешним полем.

Групповая скорость V квазичастицы определяется как

$$V_n = \frac{dE_n}{dP} = \frac{d}{\hbar} \frac{dE_n(qd)}{d(qd)}.$$

Для свободного электрона $E = p^2/2m$, и групповая скорость $v = dE/dp = p/m$ совпадает с классической скоростью частицы. Для квазичастицы из уравнения (13.92) получаем

$$V_n(qd) = \frac{2d}{\hbar\beta} E_n^\infty (-1)^{n+1} \sin qd = \frac{\pi^2 \hbar}{\beta m d} n^2 (-1)^{n+1} \sin qd. \quad (13.97)$$

Функция показана на рис. 13.16. Около края зон возникают стоячие волны, $V_n(\pi n) = 0$, и энергия не перемещается по кристаллу. Максимумы скорости достигаются при $qd = \pm\pi/2; \pm 3\pi/2 \dots$

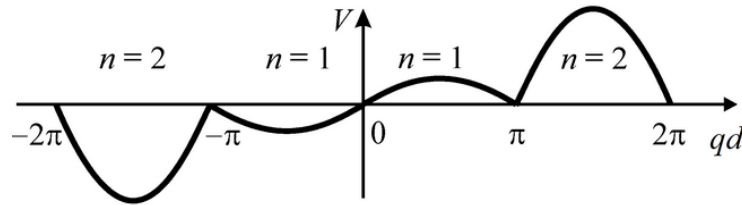


Рис. 13.16. Групповая скорость квазичастицы в зависимости от квазиимпульса q . Она обращается в нуль на границах зон Бриллюэна

Эффективная масса. Инертная масса определяется на основе второго закона Ньютона:

$$F = \frac{dp}{dt} = m \frac{dv}{dt}, \quad m = \frac{dp}{dv} = \left(\frac{dv}{dp} \right)^{-1} = \left(\frac{d^2 E}{dp^2} \right)^{-1}.$$

Для квазичастицы $P = \hbar q$, и для зоны n находим

$$m_n^* = \left(\frac{dV_n}{dP} \right)^{-1} = \frac{\hbar}{d} \left[\frac{dV_n}{d(qd)} \right]^{-1} = \left(\frac{d^2 E_n}{dP^2} \right)^{-1}.$$

Около минимума функции $E_n(qd)$ эффективная масса положительна, около максимума – отрицательна. Рост функции $V_n(qd)$ соответствует положительной массе, убывание – отрицательной.

Из соотношения (13.97) находим

$$m_n^*(qd) = \frac{\hbar^2 \beta}{2d^2 E_n^\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{\cos qd} = m \frac{\beta}{\pi^2 n^2} \frac{(-1)^{n+1}}{\cos qd}. \quad (13.98)$$

Графики для первых двух зон показаны на рис. 13.17. Для первой зоны $(-\pi \leq qd \leq \pi)$ –

$$m_1^*(qd) = m \frac{\beta}{\pi^2} \frac{1}{\cos qd}. \quad (13.99)$$

В середине первой зоны с учетом выражения (13.95) для ширины зоны –

$$m_1^*(0) = m \frac{\beta}{\pi^2} = \frac{2\hbar^2}{d^2} \frac{1}{\Delta E_1} > 0. \quad (13.100)$$

Эффективная масса в середине первой зоны обратно пропорциональна ширине зоны. У края первой зоны

$$m_1^*(\pi) = -m \frac{\beta}{\pi^2} < 0. \quad (13.101)$$

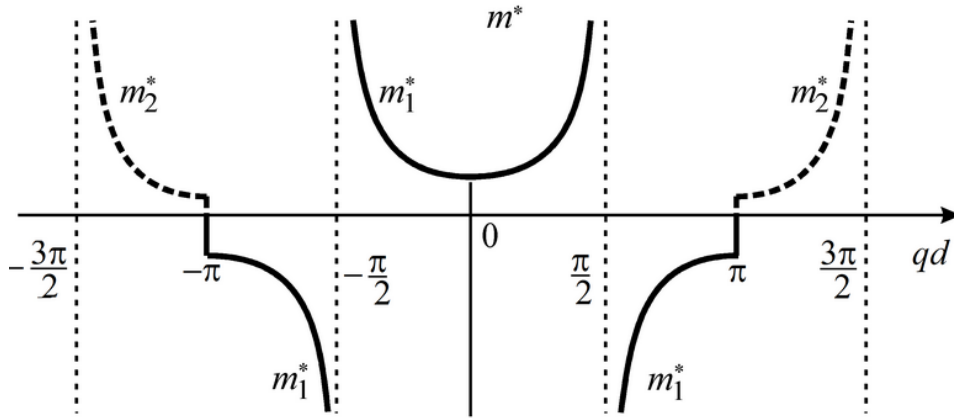


Рис. 13.17. Эффективная масса частицы в зависимости от ее квазиимпульса

Если под действием внешней силы F квазиимпульс электрона увеличивается, приближаясь к границе зоны, то усиливается отраженная волна. Импульс, приходящий к электрону от решетки, направлен против F и имеет большую величину, поэтому ускорение направлено против силы, и масса квазичастицы отрицательная. Около нижней границы второй зоны $|qd| = \pi$ из равенства (13.98) получаем

$$m_2^*(\pi) = m \frac{\beta}{4\pi^2} = \frac{1}{4} m_1^*(0). \quad (113.102)$$

Если внешняя сила увеличивает квазиимпульс и электрон удаляется от нижней границы второй зоны, то отраженная от решетки и идущая навстречу волна ослабевает, и электрон получает дополнительное ускорение в сторону

силы. Поэтому масса квазичастицы положительна и меньше, чем $m_1^*(0)$. При высокой проницаемости барьера ($\beta \ll 4\pi^2$) эффективная масса гораздо меньше массы m свободного электрона.

13.7.4. Система многих электронов в кристалле

Чтобы найти распределение электронов по рассмотренным стационарным состояниям (зонам) строгим образом нам пришлось бы принять во внимание взаимодействие электронов друг с другом, но это привело бы к невероятным математическим трудностям. Неумение учитывать взаимодействие электронов является главным источником неуверенности в приложениях электронной теории металлов. В некоторых задачах мы будем в состоянии определить, как будет влиять электронное взаимодействие, и даже сможем приближенно учесть это взаимодействие, но во многих случаях остаются большие сомнения. Итак, пока примем, что электроны не взаимодействуют между собой, и будем лишь считать, что их средний заряд учтен в нашем определении потенциала.

Однако мы должны принять во внимание принцип Паули, согласно которому в одном квантовом состоянии может находиться самое большее два электрона с противоположными спинами. Состояние, соответствующее наименьшей энергии всей системы, получается при заполнении $NrZ/2$ низших состояний (N – число элементарных ячеек в кристалле, r – число атомов в ячейке, а Z – число электронов на атом). Энергию самого высокого состояния мы будем обозначать через $E_{\max}$.

Тогда возникнут две различные возможности. Либо $E_{\max}$ совпадает с верхней границей одной из энергетических зон, так что эта зона целиком заполнена, а следующая за ней совершенно пуста, либо же $E_{\max}$ лежит внутри зоны.

В первом случае состояние с низшей энергией не будет началом непрерывного энергетического спектра для всего кристалла, поскольку оно отделено от всех более высоких состояний конечной щелью. Это ясно из того, что невозможно создать никакое другое распределение электронов без перемещения по крайней мере одного из них в соседнюю зону, для чего требуется конечная энергия. Такое вещество не могло бы реагировать на малое внешнее воздействие. Например, электроны не могли бы так перераспределиться, чтобы компенсировать внешнюю разность потенциалов. Поэтому такое вещество должно быть изолятором. С другой стороны, если в последней зоне есть свободные состояния, то возникнет возможность перемещения электронов в состояния со слегка измененной энергией так, чтобы мог возникнуть ток. Можно так же, образуя волновые пакеты, создать неоднородное распределение зарядов. В этом случае мы имеем дело с проводником, или металлом.

Когда на элементарную ячейку приходится один атом, т. е. число состояний в зоне равно числу атомов, невозможно до конца заполнить какое-либо число зон, если число электронов, приходящихся на один атом, не является четным. Отсюда можно сделать вывод, что все элементы с нечетными атомными номерами Z , имеющие решетки с $r = 1$, должны быть проводниками.

На первый взгляд можно было бы ожидать, что справедливо и такое правило: все четные элементы с $r = 1$ должны быть неметаллами (изоляторами). Однако это неверно, так как зоны могут перекрываться по энергиям (рис. 13.13). Для заданного q значения энергий разных зон $E_n(q)$, вообще говоря, различны, однако наибольшее значение $E_n(q)$ вполне может оказаться выше минимума $E_{n+1}(q)$. Это всегда будет иметь место при очень больших энергиях, где, как мы видели в одномерном случае, энергетические щели у границы зоны всегда очень малы. Поэтому среди элементов с простой структурой преобладают металлы.

Изоляторы же чаще встречаются среди более сложных структур, поскольку в этом случае число состояний в зоне уменьшается в r раз и составляет лишь $1/r$ -ю часть числа атомов. При этом более вероятно, что верхние зоны будут разделены по энергии.

Нижние по энергии зоны, которые целиком заполнены, могут быть совершенно исключены из рассмотрения, если речь идет о проводимости и аналогичных явлениях. Такие зоны включают состояния, соответствующие внутренним атомным оболочкам. Самая высокая по энергии заполненная зона называется *валентной*.

Частично заполненную верхнюю зону называют *зоной проводимости*. На рисунке 13.18а показана энергетическая схема чистых кристаллов диэлектриков или полупроводников, которые отличаются только шириной запрещенной зоны ΔE_{vc} .

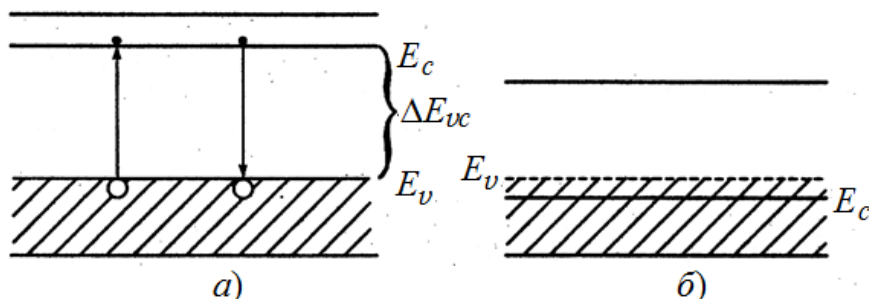


Рис. 13.18. Энергетические зоны: *а* – для полупроводников и диэлектриков; *б* – металлов

В полностью заполненной валентными электронами нижней зоне (валентной зоне) создать направленное движение электронов (электрический ток) невозможно, так как ускорение электронов электрическим полем означает перевод их на более высокие свободные уровни, которых в валентной зоне нет.

Если же валентные электроны получают дополнительную энергию $E \sim \Delta E_{vc}$, например поглотив квант света, то они попадают в свободную зону (переход указан стрелкой вверх на рис.13.18а), где легко ускоряются электрическим полем (в зоне проводимости). Одновременно в валентной зоне образуются вакантные уровни (дырки), которые позволяют ускорять электроны и в валентной зоне. Даже при наличии только одной дырки в таких переходах будут участвовать многие электроны, увеличивая последовательно свою

энергию, поэтому удобнее следить за движением в зоне дырки, энергия которой возрастает при перемещении на энергетической схеме вниз, когда электроны увеличивают свою энергию (перемещаются вверх). Дырка является квазичастицей, которой можно приписать определенную массу, скорость, энергию и положительный заряд, так как она движется в сторону, противоположную движению электронов.

Таким образом, при переходах электронов под действием добавочной энергии, поставляемой, например, теплом или светом, из валентной зоны в свободную появляются одновременно электронная и дырочная проводимости.

С ростом температуры вероятность таких переходов возрастает, число электронов и дырок в зонах увеличивается, и электропроводность растет. Переходам с образованием (генерацией) электронно-дырочных пар сопутствуют обратные переходы (рекомбинация электронов и дырок). В условиях равновесия скорость генерации равна скорости рекомбинации, чему будет соответствовать некоторая равновесная плотность электронов и дырок.

Полупроводники и диэлектрики различают лишь по ширине запрещенной зоны ΔE_{vc} . *Диэлектриками* считаются вещества, для которых $\Delta E_{vc} > 3,5$ эВ. При такой щели носители заряда практически не образуются. Вещества, имеющие ширину щели в пределах $0,1 \text{ эВ} < \Delta E_{vc} < 3,5 \text{ эВ}$ считаются *полупроводниками*. К примеру, у германия (Ge) ширина щели равна 0,7 эВ, у кремния (Si) – 1,1 эВ. И наконец, вещества, у которых валентная зона перекрывается с зоной проводимости (рис.13.18б), образуя общую зону проводимости, называются *проводниками*, такая ситуация характерна для металлов.

Глава 14. Рассеяние нейтронов кристаллами.

Динамическая дифракция

14.1. Рассеяние нейтронов ядрами. Псевдопотенциал Ферми

В этой главе обсудим процессы рассеяния нейтронов кристаллами. Они более детально, чем в предыдущей главе, проясняют, каким образом в кристалле формируются волны разной симметрии и как образуется щель в спектре частиц, взаимодействующих с кристаллом в приближении слабой связи. Будем рассматривать медленные нейтроны, к которым обычно относят нейтроны с энергиями, меньшими 10 кэВ. Эта энергия порядка энергии первого возбужденного состояния ядра, поэтому такие нейтроны могут испытывать только упругое рассеяние. У них не хватает энергии, чтобы покинуть ядро, оставив его в возбужденном состоянии, т. е. испытать неупругое рассеяние.

К медленным относят и так называемые *тепловые* и *холодные нейтроны*, наиболее часто используемые в экспериментах по изучению структуры вещества методами рассеяния. Источниками таких нейтронов являются исследовательские реакторы, на них же и проводятся основные исследования с нейтронами. Замедлителем нейтронов и охладителем активной зоны (где протекает цепная реакция деления урана под действием медленных нейтронов с образованием новых быстрых) в таких реакторах является обычная вода при комнатной температуре, поэтому большая часть нейтронов находится в тепловом равновесии с этой водой. Такие нейтроны и называются *тепловыми*. Наиболее вероятная скорость движения тепловых нейтронов (для максвелловского распределения по скоростям) при температуре 295 К (22 °С) составляет 2200 м/с, а энергия – 0,025 эВ. Длина волны нейтрона определяется соотношением де Бройля

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_n v} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_n}} = \frac{2,86 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{E_n [\text{эВ}]} [\text{см}]} \approx \frac{0,3}{\sqrt{E_n [\text{эВ}]} [\text{Å}]}.$$

Так что длина волны такого стандартного теплового нейтрона составляет $\sim 1,8 \text{ Å}$, а это есть типичное расстояние между атомами в веществе, поэтому тепловые нейтроны играют наиболее важную роль в исследованиях структуры материалов.

В силу нейтральности нейтроны взаимодействуют главным образом ядерными силами с ядрами атомов, электромагнитное взаимодействие их магнитного момента с атомами на несколько порядков меньше, поэтому им в большинстве случаев можно пренебречь.

Как видим, радиусы ядер R_N , имеющие порядок 10^{-12} см, много меньше длин волн тепловых нейтронов, следовательно, их упругое рассеяние на ядрах изотропно, т. е. амплитуда рассеяния не зависит от угла рассеяния. Однако ядерное рассеяние нейтронов принято характеризовать длиной рассеяния a , которая равна амплитуде рассеяния с противоположным знаком $a = -A$. Длины

рассеяния измеряются экспериментально, и для большинства ядер они положительны и имеют порядок размера ядер.

Поскольку длины волн тепловых нейтронов $\lambda \gg R_N$, то, как мы отмечали ранее, при рассеянии нейтрон не чувствует пространственную структуру ядра. Ядро конечного радиуса рассеивает точно так же, как точечное. На этом основании для описания процессов рассеяния нейтронов на веществе (т. е. на ядрах, расположенных в определенных точках пространства) Ферми предложил точечный псевдопотенциал, который описывает взаимодействие нейтрона с отдельным ядром так, чтобы в борновском приближении эффективное сечение рассеяния правильно выражалось через амплитуду (или длину) рассеяния:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_v) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu_v} a_v \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_v). \quad (14.1)$$

Здесь a_v – длина рассеяния ($a_v = -A_v$) нейтрона ядром, расположенным в точке $\mathbf{r}_v$; μ_v – приведенная масса нейтрона и этого ядра.

Вычисляя амплитуду рассеяния в борновском приближении для такого ядра, находящегося в начале координат, согласно соотношению (12.62) находим ее правильное значение:

$$A_v = -\frac{\mu_v}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3r = -a_v. \quad (14.2a)$$

Пусть рассеивающие ядра связаны в N -атомную молекулу (кристалл). Дифференциальное сечение рассеяния на этой молекуле в системе центра инерции нейтрона и всей молекулы в единичный телесный угол с переходом молекулы из i -го в l -е состояние в борновском приближении можно записать (см. соотношение (12.61)) как

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{li} = \frac{k}{k_0} |A_{li}(\theta)|^2, \quad (14.2б)$$

где амплитуда рассеяния

$$A_{li} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle l\mathbf{k} | V(\mathbf{r}, \mathbf{r}_v) | i\mathbf{k}_0 \rangle = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle l | \int d^3r e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \sum_v V_v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_v) | i \rangle,$$

а псевдопотенциал каждого атома молекулы имеет вид

$$V_v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_v) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu_v} a_v \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_v), \quad (14.3)$$

и, соответственно,

$$V(\mathbf{r}) = \sum_v V_v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_v) = \sum_v \frac{2\pi\hbar^2}{\mu_v} a_v \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_v). \quad (14.4)$$

Амплитуда рассеяния на такой молекуле приобретает следующий вид:

$$A_{li} = -\langle l | \sum_v \frac{\mu}{m_v} a_v e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_v} | i \rangle \equiv -\langle l | \sum_v b_v e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_v} | i \rangle. \quad (14.5)$$

Появившаяся в соотношении (14.5) величина b_v называется *длиной рассеяния связанным ядром (связанная длина или амплитуда рассеяния)* в отличие от a_v – длины рассеяния свободным ядром.

$$b_v = \frac{\mu}{m_v} a_v = \frac{1 + \frac{1}{A_v}}{1 + \frac{1}{A}} a_v. \quad (14.6)$$

Здесь

$$\mu_v = \frac{m_n M_v}{m_n + M_v} \approx m_n \frac{A_v}{1 + A_v} = m_n \frac{1}{1 + \frac{1}{A_v}} \quad (14.7)$$

есть приведенная масса нейтрона и v -го ядра с массой M_v и массовым числом A_v ; m_n – масса нейтрона;

$$\mu = m_n \frac{1}{1 + \frac{1}{A}}, \quad A = \sum_{v=1}^N A_v \quad (14.8)$$

приведенная масса нейтрона и всей молекулы в целом; A – массовое число молекулы.

Таким образом, из соотношения (14.5) следует, что амплитуда рассеяния на молекуле с переходом молекулы из i -го в l -е состояние (в с. ц. м. нейтрона и всей молекулы) есть сумма связанных амплитуд рассеяния каждым атомом молекулы с фазами, которые определяются положением атома $\mathbf{r}_v$ в пространстве. Соответственно, сечение рассеяния –

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{li} = \frac{k}{k_0} |A_{li}(\theta)|^2 = \frac{k}{k_0} \left| \sum_v b_v \langle l | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_v} | i \rangle \right|^2. \quad (14.9)$$

Отсюда следует, что при $qR \ll 1$, где R – размер молекулы (т. е. $R \ll \lambda$), в сечении не нулем будет только диагональный матричный элемент

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{li} \approx \frac{k}{k_0} \left| \sum_v b_v \langle l | 1 | i \rangle \right|^2 = \frac{k}{k_0} \left| \sum_v b_v \delta_{li} \right|^2, \quad (14.10)$$

т. е. отлично от нуля только сечение упругого рассеяния.

Таким образом, чтобы возбудить молекулу, длина волны нейтрона должна быть меньше размера молекулы.

14.2. Когерентное рассеяние нейтронов кристаллическим веществом

Здесь мы будем рассматривать только упругое рассеяние. Положения ядер в кристалле $\mathbf{r}_n$ определяются тремя базисными векторами решетки, называемыми векторами трансляций $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ следующим образом:

$$\mathbf{r}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i, \quad (14.11)$$

где n_i – целые числа. Пример двумерной кристаллической решетки, в узлах которой находится по одному атому, приведен на рис. 14.1.

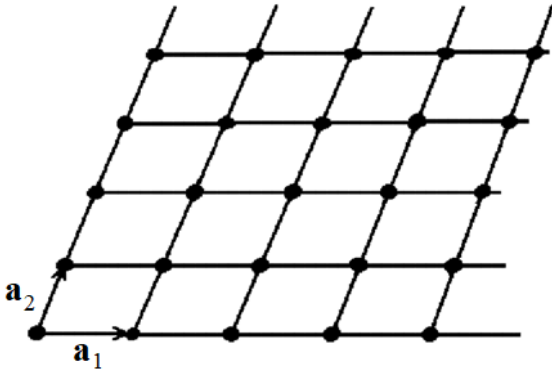


Рис. 14.1. Моноатомная двумерная кристаллическая решетка

Потенциал взаимодействия нейтрона с кристаллом можно записать в виде суммы потенциалов атомов, расположенных в узлах решетки $\mathbf{r}_n$:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_n V_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu_n} \sum_n a_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n). \quad (14.12)$$

Амплитуда рассеяния на таком потенциале будет иметь вид

$$\begin{aligned} A &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \sum_i \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d^3r = -\sum_i \frac{\mu}{\mu_i} a_i \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d^3r = \\ &= -\sum_i \frac{m_n}{\mu_i} a_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} \equiv -\sum_i b_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}. \end{aligned} \quad (14.13)$$

Здесь μ_i и μ – приведенная масса нейтрона и i -го ядра с массой M_i и приведенная масса нейтрона и всего кристалла в целом с массой $M = \sum_i M_i$ соответственно; b_i – связанная длина рассеяния i -м ядром. Если все ядра одинаковы и достаточно тяжелы, то $a \approx b$, так что сечение упругого рассеяния нейтрона кристаллом (в пересчете на одно ядро) будет иметь вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{N} \left| \sum_n e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_n} \right|^2 = \frac{a^2}{N} \left| \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{in_1\mathbf{q}\mathbf{a}_1 + in_2\mathbf{q}\mathbf{a}_2 + in_3\mathbf{q}\mathbf{a}_3} \right|^2 \equiv \frac{a^2}{N} F(\mathbf{q}), \quad (14.14)$$

где

$$F(\mathbf{q}) = \left| \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{in_1 \mathbf{q} \mathbf{a}_1 + in_2 \mathbf{q} \mathbf{a}_2 + in_3 \mathbf{q} \mathbf{a}_3} \right|^2 = \left| \sum_{n_1=0}^{N_1-1} e^{in_1 \mathbf{q} \mathbf{a}_1} \sum_{n_2=0}^{N_2-1} e^{in_2 \mathbf{q} \mathbf{a}_2} \sum_{n_3=0}^{N_3-1} e^{in_3 \mathbf{q} \mathbf{a}_3} \right|^2. \quad (14.15)$$

$N = N_1 N_2 N_3$ – число атомов в кристалле. Таким образом,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{N} F(\mathbf{q}) = \frac{a^2}{N} \left| \sum_{n_1} e^{in_1 \mathbf{q} \mathbf{a}_1} \sum_{n_2} e^{in_2 \mathbf{q} \mathbf{a}_2} \sum_{n_3} e^{in_3 \mathbf{q} \mathbf{a}_3} \right|^2. \quad (14.16)$$

Используя формулу для суммы геометрической прогрессии для каждой из сумм, входящих в произведение (14.15), получаем

$$F_i(\mathbf{q}) = \left| \sum_{n_i=0}^{N_i-1} e^{in_i \mathbf{q} \mathbf{a}_i} \right|^2 = \left| \frac{1 - e^{iN_i \mathbf{q} \mathbf{a}_i}}{1 - e^{i \mathbf{q} \mathbf{a}_i}} \right|^2 = \frac{\sin^2 \frac{N_i \mathbf{q} \mathbf{a}_i}{2}}{\sin^2 \frac{\mathbf{q} \mathbf{a}_i}{2}}. \quad (14.17)$$

При больших N эта функция имеет резкие максимумы при значениях переданного импульса (т. е. определенных направлениях рассеяния), которые определяются из

$$\frac{\mathbf{q} \mathbf{a}_i}{2} = 0, \pi, 2\pi, \dots, \quad (14.18)$$

причем ее значение в максимумах равно N_i^2 .

На рисунке 14.2 изображены графики зависимости от x функций $y = F_i(x)/N_i$, где $x = \mathbf{q} \mathbf{a}_i/2$ при $N_i = 20$ и $N_i = 60$.

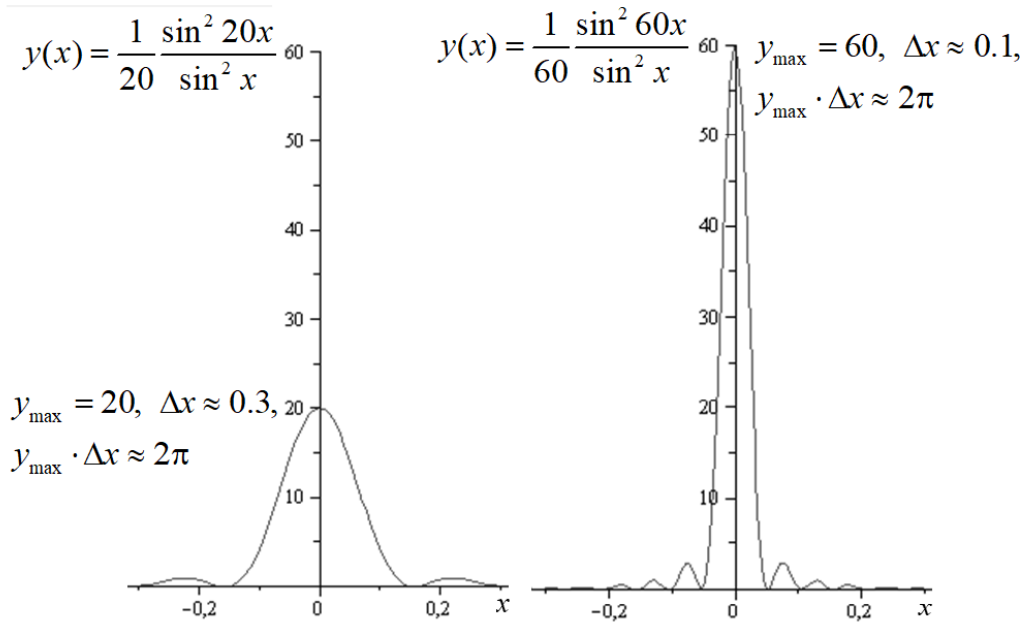


Рис. 14.2. Графики функций $y = F_i(x)/N_i$ ($x = \mathbf{q} \mathbf{a}_i/2$) при $N_i = 20$ (слева); $N_i = 60$ (справа) вблизи максимума при $x = 0$. Пики повторяются при $x = \pi h$, где h – целое число

При увеличении N ширина пика уменьшается: у основания она равна $\Delta x = 2\pi/N$, высота же растет как $y_{\max} = N$. Таким образом, площадь под пиком остается постоянной и равной $\Delta x y_{\max}/2$ (это наглядно следует из рис. 14.2, если аппроксимировать пики треугольниками, точное вычисление интеграла приводит к тому же результату).

Таким образом, сечение (в пересчете на одно ядро) будет иметь вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{N} \left| \sum_{n=0}^{N-1} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_n} \right|^2 = a^2 \prod_{i=1}^3 \frac{1}{N_i} \frac{\sin^2 \frac{N_i \mathbf{q}\mathbf{a}_i}{2}}{\sin^2 \frac{\mathbf{q}\mathbf{a}_i}{2}} \equiv \frac{a^2}{N} F(\mathbf{q}). \quad (14.19)$$

При больших N оно имеет резкие максимумы для некоторых направлений, когда переданный кристаллу (или кристаллом) импульс $\mathbf{q}$ удовлетворяет условию

$$\mathbf{q}\mathbf{r}_n = n_1 \mathbf{q}\mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{q}\mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{q}\mathbf{a}_3 = 2\pi n, \quad (14.20)$$

где n_i – целые числа. В результате для этих направлений $\mathbf{q}$ все амплитуды складываются когерентно, и сечение рассеяния, приходящееся на одно ядро, возрастает в N раз, а это величина макроскопическая, поскольку $N \sim 10^{23}/\text{см}^3$. Следовательно, когерентное рассеяние на кристалле происходит анизотропно и только с определенным $\mathbf{q}$.

Из формулы (14.20) также следует, что сечение отлично от нуля при выполнении уравнений

$$\mathbf{q}\mathbf{a}_1 = 2\pi h, \quad \mathbf{q}\mathbf{a}_2 = 2\pi k, \quad \mathbf{q}\mathbf{a}_3 = 2\pi l, \quad (14.21)$$

где h, k, l – целые числа, которые называются *условиями дифракции Лауэ*.

14.2. Обратное пространство. Векторы обратной решетки. Условие Вульфа – Брэгга

Решения уравнений Лауэ образуют решетку в так называемом *обратном пространстве волновых векторов* $\mathbf{q}$. Они называются *векторами обратной решетки*.

Для их нахождения удобно ввести базисные *векторы обратной решетки* $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$, для определения которых рассмотрим вектор $\mathbf{q} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$, где h, k и l – числа, входящие в уравнения Лауэ (14.21). Последние будут последовательно удовлетворены, если

$$\begin{aligned} 1) \quad & \mathbf{b}_1 \mathbf{a}_1 = 2\pi; \quad \mathbf{b}_2 \mathbf{a}_1 = 0; \quad \mathbf{b}_3 \mathbf{a}_1 = 0; \\ 2) \quad & \mathbf{b}_1 \mathbf{a}_2 = 0; \quad \mathbf{b}_2 \mathbf{a}_2 = 2\pi; \quad \mathbf{b}_3 \mathbf{a}_2 = 0; \\ 3) \quad & \mathbf{b}_1 \mathbf{a}_3 = 0; \quad \mathbf{b}_2 \mathbf{a}_3 = 0; \quad \mathbf{b}_3 \mathbf{a}_3 = 2\pi. \end{aligned} \quad (14.22)$$

Откуда следует, что

$$\mathbf{b}_1 \perp \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3; \quad \mathbf{b}_2 \perp \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1; \quad \mathbf{b}_3 \perp \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \quad (14.23)$$

и

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{(\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}; \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{(\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}; \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{(\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}. \quad (14.24)$$

Это и есть основные (базисные) *векторы обратной решетки*. Любая их суперпозиция также представляет вектор обратной решетки. Выполнение условий дифракции означает равенство переданного импульса $\mathbf{q}$ какому-либо из векторов обратной решетки $\mathbf{g}$:

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{g},$$

где $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}_0$ – конечный и начальный волновые векторы нейтрона соответственно; $\mathbf{g}$ – вектор обратной решетки: $\mathbf{g} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$. Целые числа (hkl) называются *индексами Миллера*. Векторы обратной решетки впервые изобрел Гиббс.

Можно показать, что любой вектор обратной решетки $\mathbf{g}$ перпендикулярен некоторой системе кристаллографических плоскостей, а его величина $g = |\mathbf{g}|$ характеризует межплоскостное расстояние $d = 2\pi/g$. Действительно, например, вектор $\mathbf{b}_2$ перпендикулярен плоскости, в которой лежат векторы решетки $\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1$, а величина $2\pi/|\mathbf{b}_2|$ (рис. 14.3) представляет собой объем параллелепипеда, образованного векторами решетки $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, деленный на площадь его грани, построенной на векторах $\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1$, а это есть не что иное, как высота параллелепипеда, т. е. *расстояние между двумя соседними плоскостями*, параллельными этой грани.

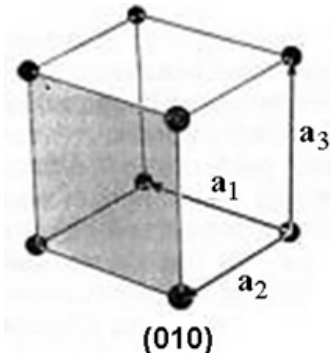


Рис. 14.3. Заштрихованная плоскость $(hkl) = (010)$, характеризующаяся вектором

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{(\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}$$

Рассмотрим еще несколько примеров суперпозиций $\mathbf{g} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$, также представляющих векторы обратной решетки. Три целых числа h, k, l определяют как вектор $\mathbf{g}$, так и систему соответствующих кристаллографических плоскостей, они обозначаются как (hkl) . Таким образом, на рис. 14.3 представлена система плоскостей (для краткости будем называть ее просто плоскостью), или плоскость $(010) = 0 \cdot \mathbf{b}_1 + 1 \cdot \mathbf{b}_2 + 0 \cdot \mathbf{b}_3$. Соответствующий вектор (010) направлен по векторному произведению $\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1$, т. е. $(010) \propto \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1$.

Плоскость $(110) = 1 \cdot \mathbf{b}_1 + 1 \cdot \mathbf{b}_2 + 0 \cdot \mathbf{b}_3 \propto \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1 = (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \times \mathbf{a}_3$. Эта плоскость показана заштрихованной на рис. 14.4, *слева*. *Справа* на том же рисунке – плоскость $(111) = 1 \cdot \mathbf{b}_1 + 1 \cdot \mathbf{b}_2 + 1 \cdot \mathbf{b}_3 \propto [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3] + [\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1] + [\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2] \equiv [(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \times \mathbf{a}_3] - [(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \times \mathbf{a}_2] = [(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \times (\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_2)]$.

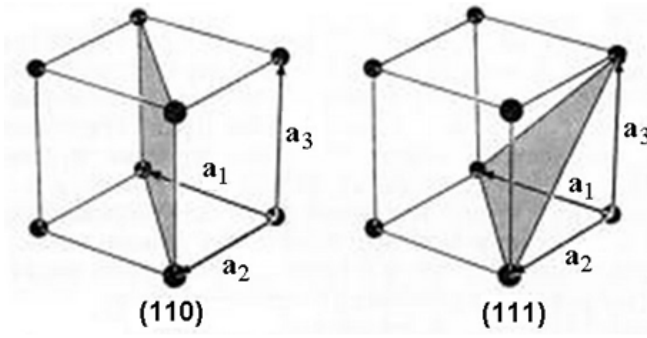


Рис. 14.4. Заштрихованные плоскости: слева – (110), характеризующаяся вектором $(110) \propto (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \times \mathbf{a}_3$; справа – (111) $\propto (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \times (\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_2)$

Для произвольного вектора обратной решетки $\mathbf{g} = (hkl)$ имеем

$$(hkl) = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{(\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])} (h[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3] + k[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1] + l[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]). \quad (14.25)$$

Введя так называемые *укороченные векторы трансляций*

$$\mathbf{a}'_1 = \mathbf{a}_1 / h, \quad \mathbf{a}'_2 = \mathbf{a}_2 / k, \quad \mathbf{a}'_3 = \mathbf{a}_3 / l, \quad (14.26)$$

получим

$$\begin{aligned} (hkl) &= h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 = \\ &= \frac{2\pi \cdot hkl}{(\mathbf{a}'_1[\mathbf{a}'_2 \times \mathbf{a}'_3])hkl} ([\mathbf{a}'_2 \times \mathbf{a}'_3] + [\mathbf{a}'_3 \times \mathbf{a}'_1] + [\mathbf{a}'_1 \times \mathbf{a}'_2]) \propto \\ &\propto (\mathbf{a}'_2 - \mathbf{a}'_1) \times (\mathbf{a}'_3 - \mathbf{a}'_2) = \left(\frac{\mathbf{a}_2}{k} - \frac{\mathbf{a}_1}{h} \right) \times \left(\frac{\mathbf{a}_3}{l} - \frac{\mathbf{a}_2}{k} \right), \end{aligned} \quad (14.27)$$

т. е. общий случай (hkl) сводится к рассмотренному выше случаю (111) введением укороченных векторов трансляций (рис 14.5).

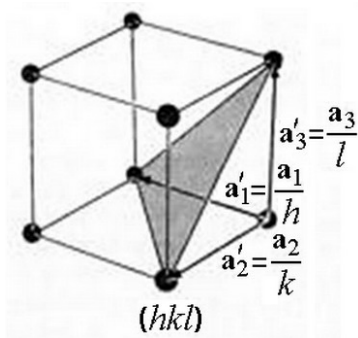


Рис. 14.5. Произвольная плоскость (hkl) проходит через вершины укороченной ячейки, определяемой векторами $\mathbf{a}'_1 = \mathbf{a}_1 / h$, $\mathbf{a}'_2 = \mathbf{a}_2 / k$, $\mathbf{a}'_3 = \mathbf{a}_3 / l$

Таким образом, кристаллическая решетка может передавать (или принимать) лишь дискретный набор импульсов:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}.$$

В силу сохранения энергии при упругом рассеянии имеем

$$k^2 = |\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}|^2 = k_0^2 \quad \text{или} \quad 2\mathbf{k}_0\mathbf{g} + g^2 = 0. \quad (14.28)$$

Это есть *условие дифракции Вульфа – Брэгга*. Его можно привести к обычному виду, введя угол θ между кристаллографической плоскостью и направле-

нием вектора $\mathbf{k}_0$: $\theta = \tilde{\theta} - \pi/2$, где $\tilde{\theta}$ – угол между векторами $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{g}$, а также используя соотношения $g = 2\pi/d$ и $k = 2\pi/\lambda$. Тогда из уравнений (14.28) получаем

$$2d \sin \theta_B = \lambda. \quad (14.29)$$

Это обычный вид известного условия Вульфа – Брэгга для угла $\theta = \theta_B$ между направлением падающей волны и кристаллографической плоскостью, называемого *углом Брэгга*, при котором происходит интенсивное дифракционное рассеяние кристаллом. Геометрически формула (14.29) очевидна (рис. 14.6).

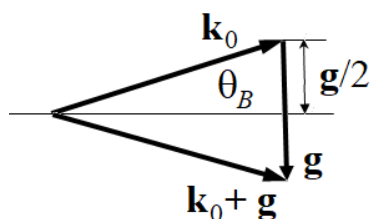


Рис. 14.6. Дифракционное рассеяние кристаллом. Векторы $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}$ и $\mathbf{g}$ образуют равнобедренный треугольник в силу равенств (14.28), поэтому $g/2 = k_0 \sin \theta_B$ или $\lambda = 2d \sin \theta_B$

Однако при написании выражения для амплитуды (14.13) и сечения (14.14) рассеяния нейтрона кристаллом мы использовали борновское приближение. Это подразумевает малость интенсивности рассеянной волны по сравнению с падающей. Это справедливо только для достаточно тонких кристаллов. При увеличении толщины кристалла интенсивность отраженного его плоскостями пучка будет возрастать, и при некоторой толщине весь пучок отразится кристаллом. Дальнейшее увеличение толщины кристалла несущественно, оно не изменит интенсивности отраженного пучка. Это обстоятельство является важным с той точки зрения, что в отражении участвует не весь кристалл, а только конечное число плоскостей вблизи его поверхности, что приводит к тому, что угловая ширина отраженного пучка является конечной, а не стремится к нулю, как это следует из выражения для сечения (14.19) при $N \rightarrow \infty$, что накладывает ограничения, например, на размеры рассеивателей, которые можно определять по угловой ширине дифракционного пучка.

Кроме того, отраженный плоскостями кристалла пучок нейтронов может отразиться еще раз. Тогда дважды отраженный пучок будет интерферировать с первоначальным, причем (как мы увидим далее) деструктивно, уменьшая его интенсивность (дважды отраженный пучок нейтронов будет в противофазе с начальным). Спрашивается, как это описать. Для этой цели нужно решить уравнение Шредингера в периодическом потенциале кристаллической решетки, что мы частично сделали в предыдущей главе в одномерном случае. Здесь же мы в определенных допущениях решим трехмерную задачу о распространении нейтрона в кристалле.

14.3. Разложение потенциала кристалла по векторам обратной решетки

Для решения этой задачи удобно потенциал кристалла, представляющий собой сумму (14.12) атомных потенциалов и обладающий свойством трансляционной инвариантности $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i)$, представить в виде суммы потенциалов всевозможных систем кристаллографических плоскостей, как это изображено на рис. 14.7. Каждую систему плоскостей можно полностью определить вектором обратной решетки $\mathbf{g}$, который перпендикулярен плоскостям и по величине равен $|\mathbf{g}| = g = 2\pi/d$, где d – межплоскостное расстояние. Потенциал любой системы плоскостей $V_{(g)}$ зависит только от координаты в направлении $\mathbf{g}$ (например x). Он является периодическим по этой координате (рис. 14.7), и его можно разложить в ряд Фурье:

$$V_{(g)}(x) = \sum_n V_n \exp\left(\frac{2\pi i}{d} nx\right) = \sum_{g_n} V_{g_n} e^{ig_n x}, \quad (14.30)$$

где

$$g_n = |\mathbf{g}_n| = \frac{2\pi n}{d}.$$

Можно считать, что каждая гармоника в соотношении (14.30) описывает потенциал своей системы плоскостей, а $\mathbf{g}_n$ представляет собой новый вектор обратной решетки (также направленный вдоль x), характеризующий эту систему (тем самым мы дифракцию n -го порядка на некоторой системе плоскостей называем дифракцией первого порядка, но на системе плоскостей с межплоскостным расстоянием $d_n = d/n$).

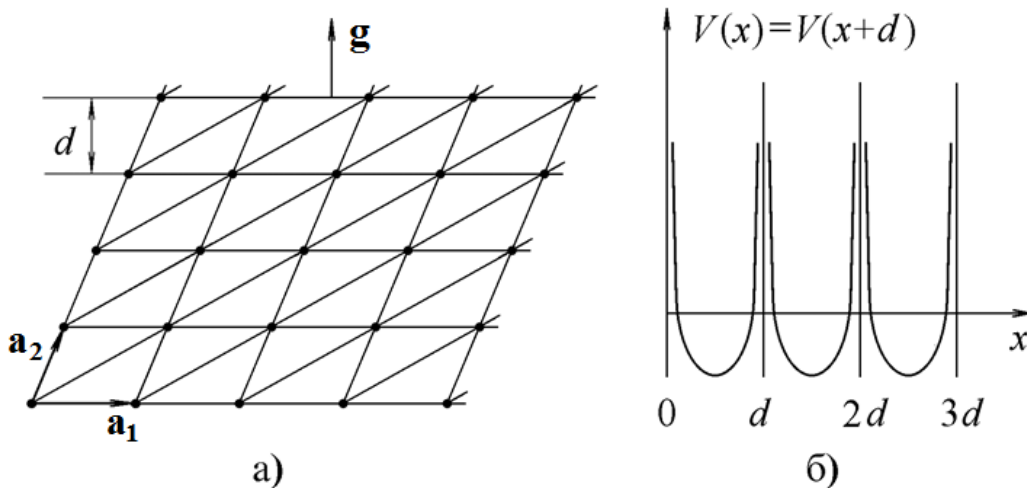


Рис. 14.7. Представление потенциала кристалла в виде суммы потенциалов всевозможных кристаллографических плоскостей. Потенциал отдельного атома при этом формируется из бесконечного числа потенциалов плоскостей, пересекающихся на данном атоме (а). Условное изображение потенциала одной из систем плоскостей, характеризующейся вектором $\mathbf{g}$ (б)

Аналогичное разложение можно провести по всем направлениям $\mathbf{g}$. В результате будем иметь так называемое *разложение потенциала кристалла по векторам обратной решетки* (см., например, работы [56–59]):

$$V(\mathbf{r}) = \sum_n V_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) = \sum_g V_g e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}, \quad (14.31)$$

где $V_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$ – потенциалы отдельных атомов, расположенных в точках $\mathbf{r}_n$, которые образуют прямую решетку кристалла. В силу вещественности потенциала $V(\mathbf{r}) = V^*(\mathbf{r})$ имеем

$$\sum_g V_g^* e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} = \sum_g V_g e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \equiv \sum_g V_{-g} e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}}, \quad (14.32)$$

откуда следует $V_g = V_{-g}^*$ или $V_{-g} = V_g^*$. В результате, положив

$$V_g = v_g \exp(i\phi_g), \quad (14.33)$$

получим

$$V(\mathbf{r}) = \sum_n V_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) = \sum_g V_g e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} = V_0 + \sum_{g>0} 2v_g \cos(\mathbf{g}\mathbf{r} + \phi_g). \quad (14.34)$$

Таким образом, каждая система плоскостей описывается теперь гармоническим потенциалом (положения плоскостей будем определять как положения максимумов этого потенциала).

Если кристалл обладает центром симметрии, то, поместив в него начало координат, имеем $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$. Добавив это условие, из соотношения (14.32) получаем $V_g = V_g^*$. Таким образом, выбором начала координат в центре симметрии кристалла мы все фазы амплитуд (14.33) гармоник потенциала обращаем в нуль, т. е. делаем все амплитуды вещественными.

Заметим, что условия трансляционной инвариантности

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = \sum_g V_g e^{i\mathbf{g}\mathbf{r} + i\mathbf{a}_i\mathbf{g}} = V(\mathbf{r})$$

будут выполняться, если для векторов $\mathbf{g}$ выполняются уравнения Лауэ $\mathbf{g}\mathbf{a}_i = 2\pi n_i$.

Умножая выражение (14.31) на $\exp(-i\mathbf{g}'\mathbf{r})$ и интегрируя по единичному объему, получаем

$$V_g = \int_{V=1} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d^3r = \sum_n \int_{V=1} V_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d^3r \quad (14.35)$$

или, сделав замену переменных $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{r}_n$ и используя уравнения Лауэ, имеем

$$V_g = \sum_n e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}_n} \int V_n(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{g}'\mathbf{r}'} d^3r' = N \int V_{at}(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{g}'\mathbf{r}'} d^3r' = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} N f_{at}(\mathbf{g}), \quad (14.36)$$

где N – число атомов в единице объема кристалла. Мы обозначили через $V_{at}(\mathbf{r})$ потенциалы атомов $V_n(\mathbf{r})$ кристаллической решетки, поскольку они все одинаковы, а через $f_{at}(\mathbf{g})$ – амплитуду рассеяния каждым атомом с передачей импульса $\hbar\mathbf{g}$.

Таким образом, видим, что амплитуда $\mathbf{g}$ -гармоники потенциала кристалла определяется амплитудой когерентного рассеяния всем кристаллом в направлении, определяемом вектором $\mathbf{g}$. В этом направлении все атомы рассеивают когерентно, их амплитуды складываются, давая N -кратное усиление рассеяния в определенных направлениях, как и было указано в предыдущем параграфе. При рассеянии нейтронов, поскольку они взаимодействуют только с ядрами атомов, амплитуда рассеяния находится подстановкой в соотношение (14.36) ядерного псевдопотенциала Ферми.

В результате получаем, что $f_{at}(\mathbf{g}) = -a$ (a – длина рассеяния). Она не зависит от переданного импульса $\hbar\mathbf{g}$, т. е. все гармоники потенциала одинаковы по амплитуде. Это связано с дельтаобразным приближением для ядерного потенциала, т. е. его бесконечно малым размером. Такое приближение справедливо лишь до тех энергий, пока $\lambda \sim d \gg R_N$, где R_N – радиус ядра. Только в этом случае амплитуды гармоник (при достаточно малых g , по сравнению с $1/R_N$) практически не зависят от $\mathbf{g}$. Например, амплитуда нулевой гармоники V_0 (определяемая амплитудой рассеяния вперед на нулевой угол), представляющая собой средний потенциал кристалла, будет практически совпадать по величине с гармониками нескольких первых порядков отражений.

Поскольку для большинства веществ $N \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$, а длины рассеяния порядка размеров ядер $a \sim 10^{-12} \text{ см}$, то оценка среднего потенциала вещества и амплитуд нескольких первых гармоник дает

$$V_g = mc^2 2\pi \tilde{\lambda}_{cn}^2 Na \approx 10^9 \cdot 6,3 \cdot 4 \cdot 10^{-28} \cdot 10^{23} \cdot 10^{-12} \text{ эВ} \sim 3 \cdot 10^{-7} \text{ эВ}. \quad (14.37)$$

Заметим, что для среднего потенциала выражение (14.36) при $\mathbf{g} = 0$

$$V_0 = \sum_n e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}_n} \int V_n(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}'} d^3r' = N \int V_{at}(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}'} d^3r' = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} N f_{at}(0) \quad (14.38)$$

справедливо не только для кристаллов, но и любых, в т. ч. и аморфных, веществ, поскольку для $\mathbf{g} = 0$ всегда выполняется условия Брэгга и справедливы уравнения Лауэ. При рассеянии вперед все атомы вещества рассеивают когерентно.

Наибольший известный потенциал для нейтронов имеет изотоп никеля ^{58}Ni : для него $V_0 = 3,6 \cdot 10^{-7} \text{ эВ}$. Такую кинетическую энергию имеют нейтроны со скоростями $v_c = 8,3 \text{ м/с}$. Для подавляющего большинства веществ длины рассеяния и, соответственно, потенциалы положительны, следовательно, нейтроны с энергиями $E < V_0$ будут отталкиваться веществом и не смогут в него проникнуть. Такие нейтроны могут храниться в полости внутри вещества (в сосуде) практически в течение всего времени их жизни. Их скорости $v < 10 \text{ м/с}$, поэтому их принято называть *ультрахолодными* (УХН). Действительно, их скорости по крайней мере в 200 раз меньше скорости тепловых нейтронов, а кинетические энергии (температура) – в 40 000 раз.

Впервые идея о возможности хранения УХН в полости за счет полного внешнего отражения была опубликована Я. Б. Зельдовичем в 1959 г. [60]. Он

также предложил использовать хранение УХН для прямого измерения времени жизни нейтрона. В настоящий момент этот метод является наиболее точным (см. работы [61, 62]).

Теперь обобщим выражение (14.36) для потенциала с учетом того, что в каждой элементарной ячейке могут находиться несколько атомов разного типа. В этом случае потенциал кристалла запишется так:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_a V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) = \sum_g V_g e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}, \quad (14.39)$$

где координата $\mathbf{r}_a$ любого атома в кристалле представляется в виде

$$\mathbf{r}_a = \mathbf{r}_n + \mathbf{r}_i, \quad (14.40)$$

где $\mathbf{r}_n$ – координата элементарной ячейки, которая определяется тремя векторами трансляций

$$\mathbf{r}_n = \sum_{n_1, n_2, n_3} n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \equiv \sum n_i \mathbf{a}_i, \quad (14.41)$$

а $\mathbf{r}_i$ – координаты атомов в элементарной ячейке относительно координаты самой ячейки.

В результате для величин V_g , суммируя сначала по атомам внутри элементарной ячейки, а затем по элементарным ячейкам, вместо уравнения (14.36) будем иметь

$$V_g = \sum_a e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}_a} \int e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}'} V_a(\mathbf{r}') d^3 r' = \sum_n e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}_n} \left(\sum_i e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}_i} \int e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}'} V_i(\mathbf{r}') d^3 r' \right),$$

так что

$$V_g = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} N_c F_g, \quad (14.42)$$

где N_c – число элементарных ячеек в единице объема и, соответственно, $\Omega_c = 1/N_c$ – объем элементарной ячейки, а величина

$$F_g = \sum_i f_i(\mathbf{g}) e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}_i} \quad (14.43)$$

носит название *структурной амплитуды* и представляет собой амплитуду рассеяния элементарной ячейкой кристалла. Она есть сумма амплитуд рассеяния атомами ячейки с фазами, определяемыми положениями $\mathbf{r}_i$ атомов в ячейке.

Имеется еще одно уточнение для выражения (14.43), описывающего структурную амплитуду рассеяния. Оно связано с тепловыми колебаниями атомов в решетке. Такие колебания размазывают практически точечный потенциал ядра до размеров амплитуды $|\mathbf{u}_i|$ колебаний атомов, которая зависит от температуры кристалла. А такой потенциал с размерами u_i не может передать импульс больше, чем $\hbar/u_i$, поэтому амплитуды гармоник (и структурные амплитуды) быстро убывают при $\mathbf{g}\mathbf{u}_i > 1$. Это убывание описывается так называемым *фактором Дебая – Уоллера* $\exp(-W_{ig})$, где

$$W_{ig} = \langle |\mathbf{g}\mathbf{u}_i|^2 \rangle.$$

В результате окончательное выражение для структурной амплитуды принимает вид

$$F_g = \sum_i e^{-W_{ig}} f_i(\mathbf{g}) e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}_i}. \quad (14.44)$$

Фактор Дебая – Уоллера также имеет смысл вероятности безотдачного рассеяния нейтрона (или другой частицы) всем кристаллом как целым, без возбуждения в нем фононов. Фонон (колебания ядер в кристалле) возбуждается при рассеянии на отдельном ядре в результате передачи ему импульса $\hbar\mathbf{g}$. Очевидно, вероятность безотдачного рассеяния будет убывать с ростом передачи импульса. Действительно, если энергия отдачи ядра (равная $\hbar^2\mathbf{g}^2/2M$) превзойдет энергию связи атома в кристалле (которая связана с амплитудой колебаний атомов, т. е. с температурой кристалла), то в этом случае атом с большой вероятностью будет вырываться из решетки, и рассеяние будет происходить как на свободном ядре. Так что при больших передачах импульса связь между атомами становится несущественной и амплитуды высоких гармоник кристалла обращаются в нуль.

При комнатных температурах для большинства кристаллов и плоскостей с низкими индексами Миллера этот фактор близок к единице и учитывается только в отдельных случаях при проведении прецизионных измерений.

Заметим, что амплитуда рассеяния на потенциале (14.39) в первом порядке теории возмущений (в борновском приближении)

$$A(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_g V_g \int e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{g})\mathbf{r}} d^3r = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_g V_g \delta_{\mathbf{q}\mathbf{g}} = N_c \sum_g F_g \delta_{\mathbf{q}\mathbf{g}}, \quad (14.45)$$

т. е. рассеяние происходит только в направлениях, определяемых переданным импульсом $\mathbf{g}$, причем передает этот импульс только соответствующая гармоника потенциала, а амплитуда рассеяния в этих направлениях увеличивается в N_c раз по сравнению с амплитудой рассеяния одной ячейкой кристалла. Сечение же возрастает в N_c^2 раз, поэтому сечение рассеяния, приходящееся на одну ячейку, в N_c раз больше сечения отдельной ячейки, а поскольку величина N_c огромна, практически все нейтроны рассеиваются в узких направлениях, определяемых условиями Брэгга.

Удобство представления потенциала кристалла в виде суммы гармонических (синусоидальных) потенциалов кристаллографических плоскостей состоит в том, что каждая синусоидальная гармоника потенциала передает (и принимает) фиксированный импульс (равный вектору обратной решетки), т. е. дает один рассеянный (или отраженный) луч.

Выделяя один из рассеянных лучей, можно создать экспериментальную ситуацию, когда существенна лишь одна система плоскостей (одна гармоника потенциала), так что потенциал кристалла при этом с высокой степенью точности можно считать синусоидальным.

Исследуя сравнительные интенсивности большого числа отражений от кристалла, можно, в принципе, восстановить более или менее точный вид потенциала.

14.4. Основные уравнения динамической дифракции

Пусть нейтроны падают на кристалл через плоскую границу, как показано на рис. 14.8, $\mathbf{n}$ – нормаль к этой границе, направленная внутрь кристалла.

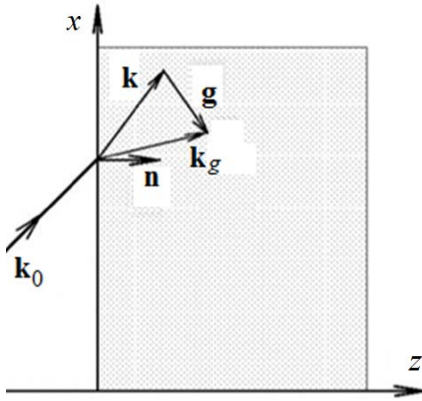


Рис. 14.8. Падение нейтрона на кристалл через плоскую границу. Здесь $\mathbf{k}_0$ – волновой вектор падающего из вакуума на кристалл нейтрона; $\mathbf{k}$ – волновой вектор нейтрона внутри кристалла; $\mathbf{g}$ – вектор обратной решетки; $\mathbf{k}_g = \mathbf{k} + \mathbf{g}$ – волновой вектор нейтрона, отраженного системой плоскостей $\mathbf{g}$; $\mathbf{n}$ – единичный вектор нормали к границе кристалла

Если начало координат поместить в плоскость границы кристалла, то ее уравнение будет иметь вид $(\mathbf{n}\mathbf{r}) = 0$. Волновая функция нейтрона в вакууме имеет вид

$$\psi_i = e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}, \quad (14.46)$$

где величина волнового вектора определяется энергией нейтрона:

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (14.47)$$

Волновая функция нейтрона внутри кристалла будет удовлетворять уравнению Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \psi, \quad (14.48)$$

где $V(\mathbf{r})$ – потенциал кристалла (см. равенство (14.39)):

$$V(\mathbf{r}) = \sum_g V_g e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} = V_0 + \sum_{g>0} 2V_g \cos(\mathbf{g}\mathbf{r} + \phi_g).$$

Поделив уравнение Шредингера (14.48) на $2m / \hbar^2 k_0^2$, перепишем его в безразмерном виде

$$\frac{1}{k_0^2} \nabla^2 \psi + \left[1 - \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2 k_0^2} \right] \psi = 0, \quad (14.49)$$

где

$$\frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2 k_0^2} = \mathcal{V}(\mathbf{r}) = \sum_g \mathcal{V}_g e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}. \quad (14.50)$$

Здесь курсивное $\mathcal{V}(\mathbf{r})$ есть относительный потенциал кристалла, т. е. потенциал, отнесенный к начальной (она же и полная) энергии нейтрона; $\mathcal{V}_g$ – амплитуды его гармоник.

Поскольку каждая система кристаллографических плоскостей передает нейтрону свой импульс $\hbar\mathbf{g}$, то волновая функция нейтрона внутри кристалла будет представляться суперпозицией волны в первоначальном направлении и волн, отраженных всевозможными системами кристаллографических плоскостей (так называемое *разложение волновой функции по векторам обратной решетки*).

Таким образом, ищем решение в виде

$$\psi = \sum_{g'} a_{g'} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{g}')\mathbf{r}}, \quad (14.51a)$$

где $\mathbf{k}$ – волновой вектор нейтрона в первоначальном направлении внутри кристалла (см. рис. 14.7), и подставляем его в уравнение (14.49). В результате получаем

$$\sum_{g'} \left[1 - \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{g}')^2}{k_0^2} \right] a_{g'} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{g}')\mathbf{r}} - \sum_{g'g} \mathcal{V}_g a_{g'} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{g}' + \mathbf{g})\mathbf{r}} = 0.$$

Переход к суммированию по $\mathbf{g}'' = \mathbf{g}' + \mathbf{g}$ вместо $\mathbf{g}'$ во втором слагаемом (замена $\mathbf{g}' = \mathbf{g}'' - \mathbf{g}$) приводит к следующей системе уравнений для амплитуд a_g :

$$\left[1 - \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{g})^2}{k_0^2} \right] a_g - \sum_{g'} \mathcal{V}_{g'} a_{g-g'} = 0. \quad (14.51б)$$

Это основные уравнения динамической дифракции. Условия разрешимости данной системы линейных однородных уравнений и граничные условия определяют набор допустимых в кристалле волновых векторов $\mathbf{k}$, с которыми нейтронная волна с заданной энергией может распространяться в кристалле. Фактически мы еще раз доказали теорему Блоха: волновая функция частицы в кристалле имеет вид

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left(a_0 + \sum_{g' \neq 0} a_{g'} e^{i\mathbf{g}'\mathbf{r}} \right) \equiv e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} F(\mathbf{r}), \quad (14.52)$$

где $\mathbf{k}$ – волновой вектор, являющийся решением системы уравнений (14.51б), а $F(\mathbf{r})$ – периодическая функция, имеющая симметрию кристалла: $F(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i)$.

Амплитуда отраженной волны a_g не мала, когда коэффициент при ней в уравнении (14.51б) близок к нулю (т. е. вблизи условия Брэгга). С другой стороны, близость к условию Брэгга означает близость энергий состояний с волно-

выми векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k} + \mathbf{g}$, что приводит к сильному перемешиванию уровней, а это и означает появление сильной отраженной волны.

На самом деле в практически важных случаях бесконечная система уравнений (14.51б) сводится всего лишь к нескольким уравнениям, описывающим прямую волну, которая распространяется в направлении, близком к первоначальному, и, может быть, несколько отраженных волн, распространяющихся в кристалле. Приведем наиболее важные примеры.

14.5. Нейтронная оптика (одноволновое приближение)

Если направление падающего на кристалл нейтрона не совпадает с брэгговским ни для одной из систем плоскостей, то в кристалле, как следует из уравнений (14.51б), существенна только одна – прямая волна. В таком (одноволновом) приближении эта система уравнений сводится к одному однородному уравнению для амплитуды этой волны:

$$\left[1 - \frac{k^2}{k_0^2} - \mathcal{V}_0 \right] a_0 = 0. \quad (14.53)$$

Условие его разрешимости определяет допустимую в кристалле величину волнового вектора нейтрона k , т. е., другими словами, величину среднего коэффициента преломления n кристалла для нейтронов:

$$1 - \frac{k^2}{k_0^2} - \mathcal{V}_0 = 0.$$

Таким образом, как мы уже отмечали ранее, коэффициент преломления определяется средним потенциалом кристалла или структурной амплитудой рассеяния вперед (с передачей нулевого импульса, $\mathbf{g} = 0$):

$$n^2 \equiv \frac{k^2}{k_0^2} = 1 - \mathcal{V}_0 = 1 + \frac{4\pi N_c}{k_0^2} F_0 = 1 - \frac{4\pi}{k_0^2} \sum_i N_i a_i, \quad (14.54)$$

так как в случае ядерного рассеяния (см. уравнение (14.43))

$$F_0 = \sum_i f_i(0), \quad f_i(0) = -a_i.$$

Поскольку амплитуды рассеяния вперед складываются всегда когерентно, одноволновое приближение, учитывающее только взаимодействие нейтрона со средним потенциалом вещества, описывает нейтронную оптику как в аморфной среде, так и в кристалле.

Влияние кристаллической структуры на распространение нейтрона в направлениях, далеких от брэгговских, можно оценить по теории возмущений (и одновременно уточнить условия применимости одноволнового приближения).

Действительно, перепишем основные уравнения (14.51б) в виде

$$\left[k_0^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{g})^2 \right] a_g - k_0^2 \mathcal{V}_0 a_g - \sum_{g' \neq 0} k_0^2 \mathcal{V}_{g'} a_{g-g'} = 0.$$

Здесь мы умножили обе части выражения (14.51б) на k_0^2 и выделили из суммы слагаемое с $g' = 0$. В результате получаем

$$\left[k^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{g})^2 \right] a_g = \sum_{g' \neq 0} U_{g'} a_{g-g'}, \quad (14.55)$$

где $k^2 = k_0^2 (1 - \mathcal{V}_0) = n^2 k_0^2$ – волновой вектор нейтрона в кристалле с учетом среднего коэффициента преломления; $U_g \equiv k_0^2 \mathcal{V}_g$ – g -гармоника потенциала в единицах квадрата волнового вектора. Нетрудно видеть, что $V_g = \hbar^2 U_g / 2m$. Уравнение (14.55) можно попытаться решить методом итераций (последовательных приближений).

Положив в качестве начального приближения $a_g = \delta_{0g}$ (т. е. в начале имеется только прямая волна) и подставив его в правую часть (14.55), для амплитуд волн, отраженных всевозможными кристаллографическими плоскостями, в первой итерации (первом порядке теории возмущений) получим

$$a_g = \frac{U_g}{\left[k^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{g})^2 \right]}. \quad (14.56)$$

Таким образом, волновая функция нейтрона в кристалле, распространяющегося в направлениях, достаточно далеких от брэгговских, в первом порядке теории возмущений запишется в следующем виде:

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \sum_g \frac{U_g}{\left[k^2 - k_g^2 \right]} \cdot e^{i\mathbf{k}_g \mathbf{r}} \equiv e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[1 + \sum_g \frac{U_g}{2\Delta_g} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \right]. \quad (14.57)$$

Здесь Δ_g – размерный параметр отклонения от условия Брэгга:

$$\Delta_g = \frac{k^2 - k_g^2}{2} = \frac{\mathbf{k}^2 - |\mathbf{k} + \mathbf{g}|^2}{2}. \quad (14.58)$$

Умножая числители и знаменатели в соотношении (14.57) на $\hbar^2/2m$, получим выражение, в точности совпадающее с формулой (12.14) стационарной теории возмущений:

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \sum_g \frac{V_g}{E_k - E_{k_g}} e^{i\mathbf{k}_g \mathbf{r}} \equiv e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left(1 + \sum_g \frac{V_g}{2\Delta_g^\varepsilon} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \right). \quad (14.59a)$$

Действительно, здесь

$$\Delta_g^\varepsilon = \frac{E_k - E_{k_g}}{2}, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad E_{k_g} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k} + \mathbf{g}|^2}{2m} - \quad (14.59б)$$

энергетический параметр отклонения от условия Брэгга, энергии состояний с волновыми векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k} + \mathbf{g}$ соответственно. Амплитуда же гармоники V_g является одновременно матричным элементом перехода из состояния $\mathbf{k}$ в состояние $\mathbf{k} + \mathbf{g}$ под действием потенциала кристалла (см. равенство (14.35)):

$$V_g = \int_{V=1} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d^3r \equiv \int_{V=1} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{g})\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3r = \langle \mathbf{k} + \mathbf{g} | V | \mathbf{k} \rangle \equiv V_{\mathbf{k}_g \mathbf{k}}.$$

При достаточном приближении к условию Брэгга для некоторого $\mathbf{g}$ (в результате изменения направления или длины волны падающего нейтрона, т. е. его энергии, рис. 14.9), в силу возрастания соответствующей амплитуды a_g , существенной становится только данная система плоскостей $\mathbf{g}$, так что

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{V_g}{E_k - E_{k_g}} \cdot e^{i\mathbf{k}_g\mathbf{r}} \equiv e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[1 + \frac{V_g}{2\Delta_g^\varepsilon} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \right]. \quad (14.59\text{в})$$

Нейтроны в зависимости от знака Δ_g^ε начинают концентрироваться на кристаллографических плоскостях (т. е. в максимумах ядерного потенциала) либо между ними (в минимумах потенциала, см. рис. 14.9).

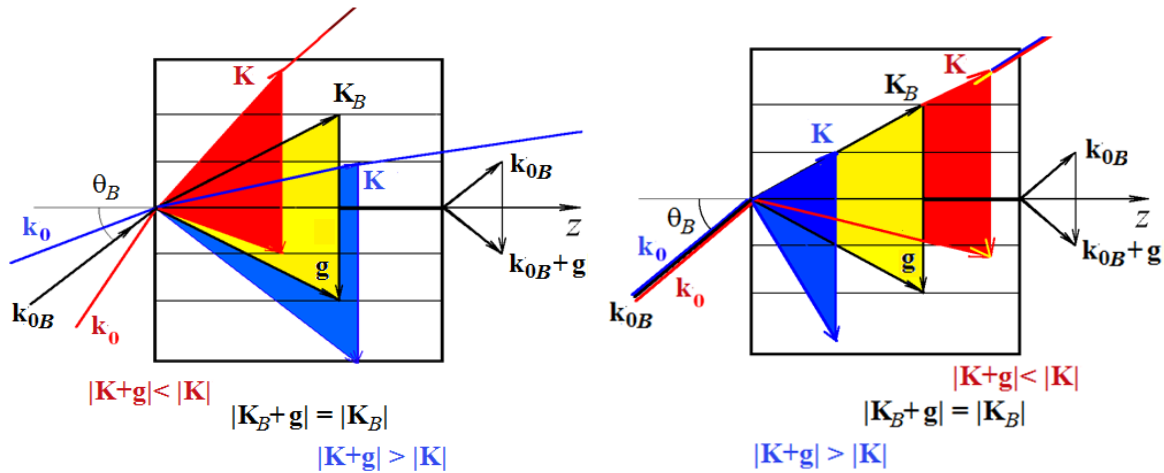


Рис. 14.9. Распространение в кристалле нейтрона с одинаковыми по величине, но с разными по направлению волновыми векторами $\mathbf{K}$ относительно вектора обратной решетки $\mathbf{g}$ (слева): при $K > |\mathbf{K} + \mathbf{g}|$ ($\Delta_g > 0$) – нейтрон концентрируется на ядерных плоскостях (красный цвет); при $K < |\mathbf{K} + \mathbf{g}|$ ($\Delta_g < 0$) – между плоскостями (синий цвет); случай $|\mathbf{K} + \mathbf{g}| = K$ ($\Delta_g = 0$) – дифракция нейтрона (желтый цвет). Распространение нейтрона с разными по величине волновыми векторами $\mathbf{K}$ (справа): три варианта $|\mathbf{K}| > |\mathbf{K} + \mathbf{g}|$, $|\mathbf{K}| < |\mathbf{K} + \mathbf{g}|$ и $|\mathbf{K}| = |\mathbf{K} + \mathbf{g}|$

Действительно, в этом случае существенными являются только средний потенциал и одна его $\mathbf{g}$ -гармоника:

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + 2V_g \cos \mathbf{g}\mathbf{r}, \quad (14.60\text{а})$$

где V_g вещественна (и для большинства веществ положительна), так как начало координат мы всегда можем выбрать в максимуме потенциала (центре его симметрии), что мы и сделали, положив фазу нулем.

Из соотношения (14.59а) для распределения плотности нейтронов получаем

$$|\psi|^2 = 1 + \frac{V_g}{\Delta_g^\varepsilon} \cos \mathbf{g} \mathbf{r}, \quad (14.60б)$$

т. е. при $\Delta_g^\varepsilon > 0$ максимумы плотности нейтронов совпадают с максимумами потенциала (нейтроны концентрируются на плоскостях), но при этом потенциал кристалла возрастает по сравнению с V_0 , и нейтроны, попадая в кристалл в этом случае, замедляются больше, чем вдали от условия Брэгга. Следовательно, при приближении к условию Брэгга коэффициент преломления (волновой вектор нейтрона в кристалле) начинает зависеть от параметра отклонения от условия Брэгга. Поэтому для волнового вектора в кристалле с учетом только среднего потенциала V_0 (очень далеко от условия Брэгга) мы будем использовать вместо $\mathbf{k}$ обозначение $\mathbf{K}$ (как на рис. 14.9): $K^2 = k_0^2 (1 - \nu_0') = n_0^2 k_0^2$, где n_0 – средний коэффициент преломления нейтрона с учетом только V_0 .

При $\Delta_g^\varepsilon > 0$ максимумы плотности нейтронов приходятся на минимумы потенциала (нейтрон концентрируется между плоскостями). В этом случае величина волнового вектора k нейтрона в кристалле (как и его кинетическая энергия) возрастает по сравнению с K .

Масштаб изменения энергии нейтрона, при котором происходит такая перестройка его волновой функции, определяется отличием энергии нейтрона ($\sim 0,01$ эВ) от брэгговской энергии, точно соответствующей условию Брэгга, на величину порядка $V_g \sim 10^{-7}$ эВ, т. е. дифракционные явления происходят в области изменения энергии или длин волн $\Delta\lambda_B/\lambda_B \sim 10^{-5}$, где λ_B – длина волны, точно соответствующая условию Брэгга.

При дальнейшем приближении к точному выполнению условию Брэгга для системы плоскостей $\mathbf{g}$ амплитуда волны, отраженной этой системой, в теории возмущений возрастает неограниченно. Теория возмущений становится неприемимой, в этом случае нужно точно решать задачу для двух волн.

14.6. Двухволновая дифракция

Если падающая нейтронная волна имеет направление, близкое к брэгговскому для одной из систем плоскостей, характеризуемой вектором $\mathbf{g}$, то в этом случае внутри кристалла существенны две волны с волновыми векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}_g = \mathbf{k} + \mathbf{g}$, т. е.

$$\psi = a_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a_g e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{g})\mathbf{r}}, \quad |a_0|^2 + |a_g|^2 = 1. \quad (14.61)$$

В этом случае уравнения (14.51б), связывающие амплитуды этих волн, принимают вид

$$\begin{aligned} \left[1 - \frac{k^2}{k_0^2} - \mathcal{V}'_0 \right] a_0 - \mathcal{V}'_{-g} a_g &= 0, \\ \left[1 - \frac{|\mathbf{k} + \mathbf{g}|^2}{k_0^2} - \mathcal{V}'_0 \right] a_g - \mathcal{V}'_g a_0 &= 0 \end{aligned}$$

или, умножая на k_0^2 и используя $K^2 = n^2 k_0^2 = k_0^2 (1 - \mathcal{V}'_0) = k_0^2 - U_0$,

$$\begin{aligned} [K^2 - k^2] a_0 - U_{-g} a_g &= 0, \\ -U_g a_0 + [K^2 - |\mathbf{k} + \mathbf{g}|^2] a_g &= 0. \end{aligned} \quad (14.62)$$

Умножением на $\hbar^2/2m$ эти уравнения точно сводятся к уравнениям (12.19, 12.20) для двухуровневой системы. Отличие состоит лишь в том, что условие разрешимости системы линейных однородных уравнений (14.62) (равенство нулю определителя) в данном случае определяет не допустимые в кристалле значения энергии частицы в кристалле (см. равенство (12.21)), а значения волнового вектора $\mathbf{k}$, поскольку энергия у нас задана начальным импульсом $\hbar k_0$ нейтрона.

Итак, условие разрешимости (14.62) имеет вид

$$(K^2 - k^2) [K^2 - |\mathbf{k} + \mathbf{g}|^2] = U_{-g} U_g = |U_g|^2. \quad (14.63)$$

Это уравнение описывает так называемую *дисперсионную (изоэнергетическую) поверхность* в пространстве волновых векторов (рис. 14.10).

При точном выполнении условия Брэгга ($k^2 = |\mathbf{k} + \mathbf{g}|^2$) будем иметь

$$k^{(1,2)2} = K^2 \mp |U_g|. \quad (14.64)$$

Двум значениям волнового вектора соответствуют два набора амплитуд a_0 и a_g , которые определяют два типа нейтронных волн (собственных состояний нейтрона в кристалле). Из первого уравнения (14.62) при точном выполнении условия Брэгга находим

$$\frac{a_g^{(1,2)}}{a_0^{(1,2)}} = \frac{K^2 - k^2}{U_{-g}} = \pm \frac{|U_g|}{U_g} = \pm 1. \quad (14.65)$$

Здесь начало координат выбрано в максимуме ядерного потенциала, т. е. фаза амплитуды гармоники $\phi_g = 0$, тем самым величина U_g вещественна и положительна. Полученный результат точно совпадает с найденным ранее в главе 12 для двухуровневых систем: при пересечении двух уровней, т. е. когда $E_k \approx E_{k_g}$, их волновые функции полностью перемешиваются, образуя симметричную и

антисимметричную комбинации, а сами уровни отталкиваются на конечное расстояние (см. равенства (12.32, 12.33)).

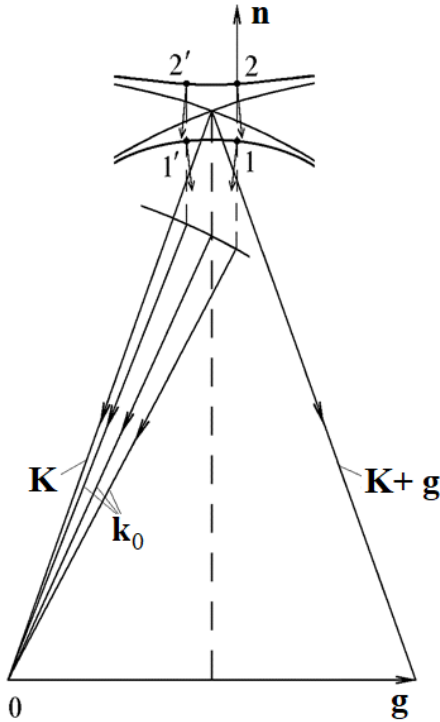


Рис. 14.10. Дисперсионная поверхность. При $V_g = 0$ это две окружности с одинаковыми радиусами, равными K . В точке пересечения (соответствующей вырождению состояний $|\mathbf{k}\rangle$ и $|\mathbf{k} + \mathbf{g}\rangle$) малое взаимодействие V_g приводит к расщеплению дисперсионной поверхности на две ветви, $\mathbf{n}$ – нормаль к входной грани кристалла. Изображен случай дифракции по Лауэ, когда $\mathbf{n} \perp \mathbf{g}$. В кристалле возбуждаются волны, соответствующие точкам 1 и 2 (или 1' и 2'), поскольку при пересечении входной границы могут изменяться только нормальные к ней компоненты импульса. Стрелками обозначены нормали к дисперсионной поверхности, которые указывают направления плотности тока (групповой скорости) нейтронов

Таким образом, при точном выполнении условия Брэгга в кристалле могут распространяться два типа блоховских волн (симметричная и антисимметричная), которые с учетом нормировки имеют вид

$$\begin{aligned}\psi^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{g})\mathbf{r}} \right) = \sqrt{2} \cos\left(\frac{\mathbf{g}\mathbf{r}}{2}\right) \exp\left[i\left(\mathbf{k}^{(1)} + \frac{\mathbf{g}}{2}\right)\mathbf{r}\right], \\ \psi^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{r}} - e^{i(\mathbf{k}^{(2)} + \mathbf{g})\mathbf{r}} \right) = i\sqrt{2} \sin\left(\frac{\mathbf{g}\mathbf{r}}{2}\right) \exp\left[i\left(\mathbf{k}^{(2)} + \frac{\mathbf{g}}{2}\right)\mathbf{r}\right].\end{aligned}\quad (14.66)$$

Как видим, распространение волн происходит вдоль кристаллографических плоскостей с волновыми векторами

$$\mathbf{k}_{\parallel}^{(1,2)} = \mathbf{k}^{(1,2)} + \mathbf{g}/2, \quad (14.67)$$

параллельными плоскостям, причем нейтроны в состоянии $\psi^{(1)}$ сконцентрированы преимущественно на ядерных плоскостях в максимумах потенциала (14.60а), а в состояниях $\psi^{(2)}$ – между ними в минимумах потенциала (рис. 14.11):

$$\begin{aligned}|\psi^{(1)}|^2 &= 2 \cos^2(\mathbf{g}\mathbf{r}/2) = 1 + \cos(\mathbf{g}\mathbf{r}), \\ |\psi^{(2)}|^2 &= 2 \sin^2(\mathbf{g}\mathbf{r}/2) = 1 - \cos(\mathbf{g}\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (14.68)$$

Таким образом, нейтроны в состояниях (1) и (2) движутся в разных потенциалах и имеют разные кинетические энергии (т. е. разные величины волновых

векторов). Нейтроны в симметричном состоянии (1) имеют меньшие кинетические энергии, чем в антисимметричном (2), что и отражает уравнение (14.64) дисперсионной поверхности.

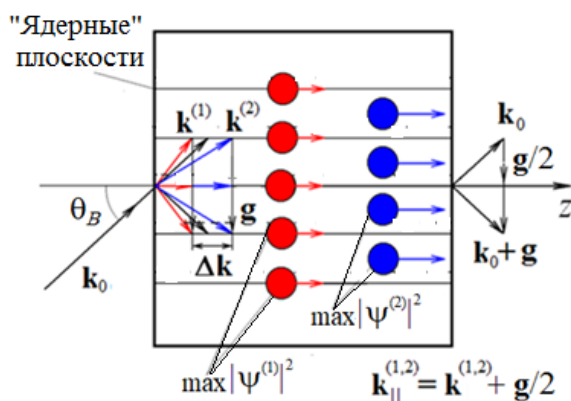


Рис. 14.11. Дифракция по Лауэ (граница кристалла перпендикулярна плоскостям): красные кружки – области максимальной концентрации нейтронов в состоянии $\psi^{(1)}$ (максимумы потенциала (14.60)); синие – в состоянии $\psi^{(2)}$ (минимумы потенциала), поэтому $k^{(1)} < k^{(2)}$

При падении нейтронов с заданной энергией и импульсом на кристалл в последнем могут возбуждаться волны обоих типов: $\psi^{(1)}$ и $\psi^{(2)}$, так что

$$\psi = c_1 \psi^{(1)} + c_2 \psi^{(2)}. \quad (14.69)$$

Амплитуды возбуждения c_1 и c_2 определяются граничными условиями на входной грани кристалла (см. ниже).

Различают две схемы дифракции: дифракцию на прохождение (*по Лауэ*) и на отражение (*по Брэггу*). Симметричные схемы дифракции по Лауэ (когда граница перпендикулярна плоскостям) и по Брэггу (когда граница кристалла параллельна отражающим плоскостям) изображены на рис. 14.12а, б.

Мы далее ограничимся рассмотрением двухволновой дифракции нейтронов для симметричного случая Лауэ (см. рис. 14.11 и 14.12а).

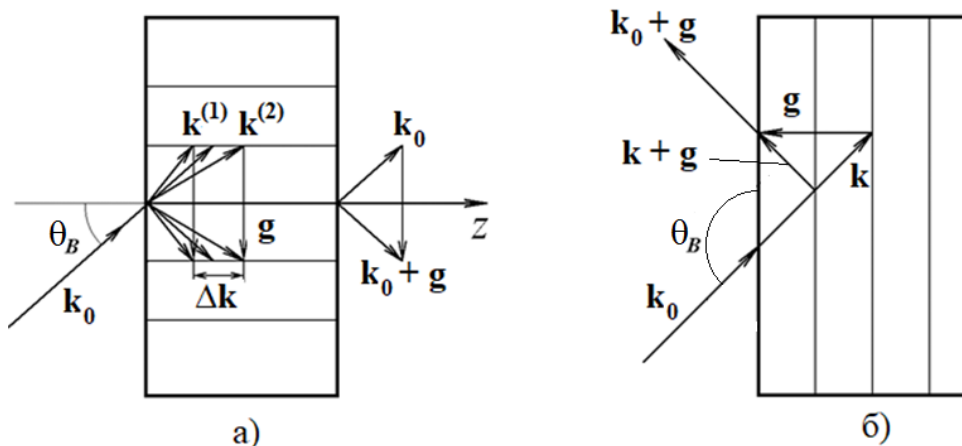


Рис. 14.12. Дифракция на прохождение; границы кристалла перпендикулярны отражающим плоскостям – симметричная схема Лауэ (а). Дифракция на отражение; входная грань кристалла параллельна плоскостям – симметричная схема Брэгга. В этом случае нейтроны проникают в кристалл на конечную глубину (б)

14.6. Дифракция по Лауэ. Маятниковый эффект

Итак, пусть слева на кристалл (см. рис. 14.12а) падает нейтрон, его волновая функция имеет (при $\mathbf{n}\mathbf{r} < 0$) вид

$$\psi_{in} = e^{ik_0 r}, \quad \mathbf{n}\mathbf{r} < 0. \quad (14.70)$$

Здесь $\mathbf{n}$ – единичный вектор нормали к границе кристалла, направленный внутрь кристалла (см. рис. 14.8). Мы в этой области пренебрегли отраженной от границы кристалла волной, которая становится существенной, лишь когда нормальная к границе кристалла компонента скорости становится меньше скорости УХН (определяемой V_0), т. е. < 10 м/с, что для тепловых нейтронов может произойти лишь при углах Брэгга, отличающихся от прямого на величине $\sim 10^{-3}$.

Внутри кристалла ($\mathbf{n}\mathbf{r} > 0$) при точном выполнении условия Брэгга волновая функция (если опять пренебречь отраженными от второй границы волнами) запишется так:

$$\psi = c_1 \left(\frac{e^{ik^{(1)}r} + e^{i(k^{(1)} + g)r}}{\sqrt{2}} \right) + c_2 \left(\frac{e^{ik^{(2)}r} - e^{i(k^{(2)} + g)r}}{\sqrt{2}} \right), \quad \mathbf{n}\mathbf{r} > 0. \quad (14.71)$$

Постоянные c_1 и c_2 находятся из граничных условий. В силу непрерывности волновая функция (14.70) падающей волны на границе (при $\mathbf{n}\mathbf{r} = 0$) должна совпадать с волновой функцией (14.71) внутри кристалла. Тогда, представив все волновые векторы в виде суммы тангенциальной и нормальной к границе составляющих $\mathbf{k} = \mathbf{k}_n + \mathbf{k}_t$ и приравняв при $\mathbf{n}\mathbf{r} = 0$ амплитуды прямых и отраженных волн, получаем

$$\begin{aligned} \sqrt{2}e^{ik_{0t}r} &= c_1 e^{ik_t^{(1)}r} + c_2 e^{ik_t^{(2)}r}, \\ 0 &= c_1 e^{ik_{gt}^{(1)}r} - c_2 e^{ik_{gt}^{(2)}r}. \end{aligned} \quad (14.72)$$

Равенства (14.72) должны выполняться для любой точки границы, а это возможно только при равенстве всех тангенциальных составляющих волновых векторов, что отвечает закону сохранения тангенциальной компоненты импульса в силу однородности пространства вдоль границы. В результате имеем

$$\begin{aligned} \sqrt{2} &= c_1 + c_2, \\ 0 &= c_1 - c_2, \end{aligned} \quad (14.73)$$

откуда следует $c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2}$.

Таким образом, при точном выполнении условия Брэгга оба типа волн возбуждаются в кристалле с одинаковой амплитудой, и волновую функцию нейтрона внутри кристалла можно представить в виде

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{2} \left(e^{i\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{g})\mathbf{r}} + e^{i\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{r}} - e^{i(\mathbf{k}^{(2)} + \mathbf{g})\mathbf{r}} \right) = \\ &= \cos\left(\frac{\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}}{2}\right) e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} + i \sin\left(\frac{\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}}{2}\right) e^{i(\mathbf{K} + \mathbf{g})\mathbf{r}}.\end{aligned}\quad (14.74)$$

Здесь $\mathbf{K} = (\mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{k}^{(2)})/2$, ось z направлена параллельно кристаллографическим плоскостям (по нормали к границе кристалла), и учтено, что вектор $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}^{(2)} - \mathbf{k}^{(1)}$ направлен по оси z , поскольку на границе кристалла может передаваться импульс, только перпендикулярный этой границе. По этой причине все волновые векторы внутри кристалла могут отличаться от волнового вектора $\mathbf{k}_0$ падающего нейтрона лишь параллельными оси z компонентами и еще на вектор обратной решетки $\mathbf{g}$.

Выражение (14.74) означает, что биения волн разного типа с разными волновыми векторами приводят к периодической по глубине кристалла перекачке интенсивности нейтронов из прямого пучка в отраженный, и наоборот. Это явление называется *маятниковым эффектом* (Pendellösung – букв. с нем. – *маятниковое решение*), поскольку очень похоже на обмен энергией между двумя связанными маятниками, который мы обсудили в главе 9.

Если выходная граница кристалла параллельна входной, то нейтроны в разных состояниях при выходе из кристалла ускорятся ровно на те же величины, на которые они замедлились на входной грани (см. рис. 14.12а), так что волновая функция нейтрона при выходе из кристалла толщиной L будет иметь вид

$$\psi_{\text{out}} = \cos\left(\frac{\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{L}}{2}\right) e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}} + i \sin\left(\frac{\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{L}}{2}\right) e^{i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})\mathbf{r}}. \quad (14.75)$$

Таким образом, маятниковый эффект приводит к осцилляциям интенсивности прямого и отраженного нейтронных пучков, прошедших через кристалл, в зависимости от величины маятниковой фазы ϕ :

$$I_{0, g} = (1 \pm \cos \phi)/2, \quad (14.76)$$

где $\phi = \Delta\mathbf{k}L$. Величина $\Delta\mathbf{k} = |\Delta\mathbf{k}| = |\mathbf{k}^{(2)} - \mathbf{k}^{(1)}|$ определяется из уравнения дисперсионной поверхности (14.64):

$$\begin{aligned}k^{(2)2} - k^{(1)2} &= (\mathbf{k}^{(2)} - \mathbf{k}^{(1)}) (\mathbf{k}^{(2)} + \mathbf{k}^{(1)}) = \\ &= 2\mathbf{K}\Delta\mathbf{k} = 2K|\Delta\mathbf{k}| \cos \theta_B = 2|U_g|,\end{aligned}\quad (14.77)$$

откуда

$$\Delta k \equiv \frac{2\pi}{\xi_g} = \frac{|U_g|}{K \cos \theta_B} = \frac{2m|V_g|}{\hbar^2 K \cos \theta_B} \approx k_0 \frac{|V_g|}{E \cos \theta_B} = \frac{2|V_g|}{\hbar v_{\parallel}} = \frac{2|V_g| \operatorname{tg} \theta_B}{\hbar v_{\perp}}. \quad (14.78)$$

Здесь $v_{\parallel} = \hbar K \cos \theta_B / m = \hbar |\mathbf{K} + \mathbf{g}| / m$ – средняя скорость нейтрона в кристалле вдоль кристаллографических плоскостей, соответственно, поперечная ско-

рость $v_{\perp} = \hbar g / 2m = \pi \hbar / md$ определяется компонентой импульса $\hbar g/2$ нейтрона, перпендикулярной плоскостям.

Величина

$$\xi_g = \frac{2\pi K \cos \theta_B}{|U_g|} \approx \frac{2\pi k_{0\parallel}}{U_g} = \frac{2\pi}{k_0} \frac{E \cos \theta_B}{V_g} = \lambda \frac{E \cos \theta_B}{V_g} \quad (14.79)$$

называется *экстинкционной длиной*, она определяет пространственный период осцилляций интенсивности в кристалле, т. е. период перекачки интенсивности из прямой волны в отраженную и обратно при точном выполнении условия Брэгга. Поскольку длины волн λ тепловых и холодных нейтронов составляют единицы ангстрем, а величины E/V_g имеют типичные значения 10^5 – 10^6 , то экстинкционные длины лежат в пределах от десятков до сотен микрон. Точно так же из соотношения (14.78) следует, что волновой вектор нейтрона при входе в кристалл меняется очень мало на величину $\sim 10^{-5}$ – 10^{-6} от самого вектора.

Наблюдать осцилляции интенсивностей прямой и отраженной нейтронных волн при заданной толщине кристалла можно, например, изменяя угол Брэгга (и тем самым длину волны нейтрона). Впервые маятниковая картина при дифракции нейтронов в кристалле кремния наблюдалась Шаллом [63].

Из выражения (14.74) следует также, что на глубине кристалла $z = \xi_g/2$ амплитуда прямой волны обращается в нуль, т. е. она полностью отражается слоем в перпендикулярном направлении толщиной $\sim \xi_g$, который содержит $\sim \xi_g/d$ плоскостей. В случае дифракции по Брэггу такой слой полностью отразит все нейтроны. Этой величиной определяется как угловая ширина дифракционного отражения, так и его ширина по длинам волн (см. рис. 14.2). Подробнее об этом можно прочитать, например, в работах [58, 62].

Обратим внимание, что, как следует из равенства (14.75), амплитуда A_g отраженной плоскостями волны в кристалле является чисто мнимой и при малых толщинах пропорциональна толщине кристалла:

$$A_g \approx i \frac{\Delta k \cdot L}{2} = i \frac{V_g}{\hbar} \cdot \frac{L}{v_{\parallel}} = i N_c F_g \frac{2\pi L}{k_0 \cos \theta_B}, \quad (14.80)$$

поэтому при увеличении толщины кристалла появляется дважды отраженная волна, которая совпадает по направлению с падающей, но имеет противоположный знак амплитуды (в противофазе) и тем самым гасит прямую волну. В конечном счете это и приводит к маятниковому эффекту.

14.7. Эффект аномальной прозрачности кристалла (эффект Бормана)

Разная симметрия волн в кристалле приводит к еще одному эффекту, который был открыт Г. Борманом в 1941 г. [64] в дифракции рентгеновских лучей и был объяснен Лауэ [65] лишь в 1949 г. Это эффект *аномальной прозрачности* кристалла для волн, проходящих через него в условиях дифракции. Эффект

обусловлен тем, что волна (1), сконцентрированная на плоскостях (из атомов), поглощается сильнее волны (2), сконцентрированной между ними.

Поглощение нейтронов в кристалле можно описать добавкой небольшой мнимой части к потенциалу $-(-iV')$, чтобы обеспечить затухание волновой функции в кристалле (а не ее возрастание), величина $V'(\mathbf{r})$ должна быть вещественна и положительна. Она точно так же раскладывается на гармоники по векторам обратной решетки, причем при наличии центра симметрии $V'_g = V'_{-g} = V'^*_g$.

Таким образом, амплитуды гармоник становятся комплексными, причем в случае наличия центра симметрии $V_g = V_{-g}$, где под V_g следует понимать $V_g - iV'_g$.

В результате уравнение дисперсионной поверхности (14.63) принимает вид

$$(K^2 - k^2) \left[K^2 - |\mathbf{k} + \mathbf{g}|^2 \right] = (U_{-g} - iU'_{-g})(U_g - iU'_g) = (U_g - iU'_g)^2$$

и при точном выполнении условия Брэгга

$$\mathbf{k}^{(1,2)2} = k_0^2 - U_0 + iU'_0 \mp (U_g - iU'_g) = \mathbf{k}_0^2 - (U_0 \pm U_g) + i(U'_0 \pm U'_g). \quad (14.81)$$

Так что

$$\Delta k^{(1,2)} = |\mathbf{k}^{(1,2)} - \mathbf{k}_0| = \frac{-(U_0 \pm U_g) + i(U'_0 \pm U'_g)}{2k_0 \cos \theta_B}, \quad (14.82)$$

и волновая функция внутри кристалла (14.71) модифицируется следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) \mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \right) e^{-i\Delta k^{(1)} z} + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} - e^{i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) \mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \right) e^{i\Delta k^{(2)} z} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{e^{i\mathbf{k}_0^{(1)} \mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{k}_0^{(1)} + \mathbf{g}) \mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \right) e^{-\frac{(U'_0 + U'_g)z}{k_0 \cos \theta_B}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{e^{i\mathbf{k}_0^{(2)} \mathbf{r}} - e^{i(\mathbf{k}_0^{(2)} + \mathbf{g}) \mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \right) e^{-\frac{(U'_0 - U'_g)z}{k_0 \cos \theta_B}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0^{(1)} e^{-\frac{(U'_0 + U'_g)z}{k_0 \cos \theta_B}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0^{(2)} e^{-\frac{(U'_0 - U'_g)z}{k_0 \cos \theta_B}}. \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{k}_0^{(1,2)}$ – вещественные части волновых векторов (мнимые дают затухание); $\psi_0^{(1,2)}$ – волновые функции состояний (1) и (2) без учета затухания. В результате после прохождения кристалла толщиной L для интенсивностей прямой и отраженной волн в состояниях (1) и (2) на его выходе будем иметь

$$I_0 = I_g = e^{-\frac{2(U'_0 \pm U'_g)L}{k_0 \cos \theta_B}} \equiv e^{-\mu_0(1 \pm \varepsilon_g)L_{\text{eff}}}. \quad (14.83)$$

Здесь

$$\mu_0 \equiv \frac{1}{L_a} = \frac{2U'_0}{k_0} = 2k_0 \frac{2mV'_0}{\hbar^2 k_0^2} = k_0 \frac{2V'_0}{E} \quad (14.84)$$

средний коэффициент поглощения нейтрона, и

$$\varepsilon_g = \frac{U'_g}{U'_0} = \frac{V'_g}{V'_0}. \quad (14.85)$$

Безразмерная величина ε_g ($0 < \varepsilon_g < 1$) характеризует степень выраженности эффекта Бормана в зависимости от кристалла и системы кристаллографических плоскостей.

Запишем:

$$L_{\text{eff}} = \frac{L}{\cos \theta_B}. \quad (14.86)$$

Эффективная толщина кристалла L_{eff} достаточно резко возрастает при приближении угла Брэгга к прямому углу. Это связано с существенным замедлением нейтрона в кристалле и существенным увеличением времени взаимодействия нейтрона с атомами кристалла, поскольку в нем, как мы отмечали, при выполнении условия Брэгга нейтрон движется вдоль кристаллографических плоскостей и его скорость равна $v_{\parallel} = \hbar k_{\parallel} = \hbar k \cos \theta_B$. В направлении, перпендикулярном плоскостям, волновые функции нейтрона представляют собой стоячие волны, поэтому в этом направлении нейтрон не распространяется (его групповая скорость или ток вероятности равны нулю).

Как следует из соотношения (14.83), при $\varepsilon_g \sim 1$ антисимметричная нейтронная волна (2) практически не затухает, тогда как волна (1) затухает с удвоенным коэффициентом. Поэтому при $L_{\text{eff}} \gg L_a = 1/\mu_0$ «выживает» только волна (2), на которую приходится половина интенсивности падающей волны – по четверти на прямой и отраженный продифрагировавшие пучки. Маятниковый эффект при этом исчезает, и на выходе из кристалла пучки в первоначальном (прямом) и отраженном направлениях имеют одинаковые интенсивности.

Для нейтронов в силу малости размеров ядра все гармоники практически одинаковы, поэтому ε_g может быть близко к 1. Отличие от единицы может быть обусловлено либо фактором Дебая – Уоллера (для монокристаллов), либо уменьшением мнимой части структурной амплитуды рассеяния с передачей импульса по сравнению с амплитудой вперед в более сложной ячейке.

К примеру, для кристалла кремния $L_{a0} = 40$ см, поэтому наблюдать эффект поглощения, а тем более эффект Бормана в таком кристалле, казалось бы, практически невозможно. Однако он оказался довольно ярко выражен при углах Брэгга, близких к $\pi/2$ [66]. Для наблюдения использовался довольно крупный совершенный кристалл кремния с размерами $130 \times 130 \times 218$ мм³. В качестве рабочей была выбрана система кристаллографических плоскостей (220) с межплоскостным расстоянием $d = 1,92$ Å. Измерялась интенсивность продифрагировавшего прямого нейтронного пучка в зависимости от угла Брэгга, величина

которого в эксперименте достигала 88° . Эффективная толщина кристалла $L_{\text{eff}} = L/\cos \theta_B$ при таком угле достигает 6,3 м.

Наилучшее согласие с экспериментом было достигнуто при значении коэффициента поглощения для волны (1)

$$\mu_1 = \mu_0 (1 + \varepsilon_{220}) = 0,05 \text{ см}^{-1}.$$

Это значение отвечает длине поглощения $L_{a(1)} = 20 \text{ см}$.

Однако из-за относительно малой, по сравнению с длиной поглощения, волны типа (2) толщины используемого кристалла (22 см) была получена лишь верхняя граница для величины коэффициента поглощения для этой волны:

$$\mu_2 = \mu_0 (1 - \varepsilon_{220}) \leq 0,003 \text{ см}^{-1}.$$

Тем не менее из него следует, что для волны (2) длина поглощения нейтрона, дифрагирующего на плоскости (220) кристалла кремния почти на порядок превосходит среднюю длину поглощения нейтрона ($L_a = 40 \text{ см}$, $\mu_0 = 0,025 \text{ см}^{-1}$) и составляет $L_{0(2)} > 300 \text{ см}$. Величина параметра $\varepsilon_{220} > 0,9$ свидетельствует о ярко выраженном эффекте Бормана для этой системы плоскостей. Она не противоречит теоретически рассчитанной величине ($\varepsilon_{220} \approx 0,97$) при данных условиях проведения эксперимента.

Литература

- [1] *Hertz H.* Über einen Einfluss des ultravioletten Lichtes auf die electrische Entladung = О влиянии ультрафиолетового излучения на электрический разряд // *Ann. Phys.*, 1887, **267**, No. 8, 983–1000.
[doi:10.1002/andp.18872670827](https://doi.org/10.1002/andp.18872670827)
- [2] *Столетов А. Г.* Актино-электрические исследования. СПб.: Тип. В. Демакова, 1889. 48 с.
- [3] *Lenard P.* Über die lichtelektrische Wirkung = О фотоэлектрическом эффекте // *Ann. Phys.*, 1902, **313**, No. 5, 149–198.
<https://doi.org/10.1002/andp.19023130510>
- [4] *Planck M.* On the Theory of the Energy Distribution Law of the Normal Spectrum = К теории распределения энергии излучения нормального спектра // *Verhandl. Dtsch. Phys. Ges.*, 1900, **2**, 237–245. Перевод изд.: *Планк М.* Избранные труды. М.: Наука, 1975. С. 251–257.
- [5] *Einstein A.* Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt = Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света // *Ann. Phys.*, 1905, **322**, 132–148. <https://doi.org/10.1002/andp.19053220607>
- [6] *Compton A.* Secondary Radiations Produced by X-Rays // *Bull. Natl. Res. Counc.*, 1922, **20**, 16–72.
- [7] *Compton A.H.* A Quantum Theory of the Scattering of X-Rays by Light Elements // *Phys. Rev.*, 1923, **21**, No. 5, 483–502.
- [8] *Debye P.* Zerstreuung von Rontgenstrahlen und Quantentheorie = Рассеяние рентгеновских лучей и квантовая теория // *Phys. Z.*, 1923, **24**, 161–166.
- [9] *De Broglie L.* A Tentative Theory of Light Quanta // *Lond. Edinb. Dubl. Philos. Mag. J. Sci.*, 1923, **47**, No. 278, 446–458. Перевод изд.: *Де Бройль Л.* Попытка построения теории световых квантов // *УФН*, 1974, **122**, Вып. 4, 562–571.
- [10] Вариационные принципы механики // Сб. статей классиков науки / под ред. Л. С. Полака. М.: Физматгиз, 1959. 932 с.
- [11] *Rutherford E.* The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom = Рассеяние α - и β -частиц веществом и строение атома // *Phil. Mag.*, 1911, **21**, 669–688. Перевод изд.: *Резерфорд Э.* Избранные научные труды. Строение атома и искусственное превращение элементов. М.: Наука, 1972. С. 207–224.
- [12] *Bohr N.* On the Constitution of Atoms and Molecules = О строении атомов и молекул // *Phil. Mag.*, 1913, **26**, 1–25 (Part I); 476–502 (Part II); 857–875 (Part III). Перевод изд.: *Бор Н.* Избранные научные труды, Т. I. М.: Наука, 1970. С. 84–148.
- [13] *Franck J., Hertz G.* Über die erregung der quecksilberresonanzlinie 253.6 μ m durch elektronenstöße = О возбуждении резонансных линий ртути при длине волны 253,6 нм столкновениями электронов // *DPG. Verhandlungen*, 1914, **16**, 512–517.

- [14] *Gerlach W., Stern O.* Das magnetische Moment des Silberatoms = Магнитный момент атома серебра // *Zs. Phys.*, 1922, **9**, No.1, 353–355.
- [15] *Davisson C., Germer L.H.* The Scattering of Electrons by a Single Crystal of Nickel // *Nature*, 1927, **119**, 558–560; Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel // *Phys. Rev.*, 1927, **30**, 705–740.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.30.705>
- [16] *Thomson G.P.* Experiments on the Diffraction of Cathode Rays // *Proc. R. Soc.*, 1928, **117**, 600–609. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1928.0022>
(Предварительное сообщение: *Thomson G.P., Reid A.* Diffraction of Cathode Rays by a Thin Film // *Nature*, 1927, **119**, 890.
<https://doi.org/10.1038/119890a0>)
- [17] *Тартаковский П. С.* Волновые взгляды на природу материи и опыт // *УФН*, 1928, **8**, 338–360.
- [18] *Heisenberg W.* Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinetik und Mechanik // *Zs. Phys.*, 1925, **33**, 879–893. Перевод изд.: *Гейзенберг В.* О наглядном содержании квантово-теоретической кинематики и механики // *УФН*, 1977, **122**, 574–585.
- [19] *Bohn M., Jogdan P.* Zur Quantenmechanik // *Zs. Phys.*, 1925, **34**, 858–888. (Перевод изд.: О квантовой механике // *УФН*, 1977, **122**, 586–611).
- [20] *Schrödinger E.* Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung) // *Ann. Phys. (Lpz.)*, 1926, **79**, Hf. 4, 361–376. Перевод изд.: *Шредингер Э.* Квантование как задача о собственных значениях (первое сообщение) // *УФН*, 1977, **122**, 621–632; *Шредингер Э.* Избранные труды по квантовой механике. М.: Наука, 1976. С. 9–20.
- [21] *Schrödinger E.* Über das Verhältnis der Heisenberg–Born–Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen = Об отношении квантовой механики Гейзенберга – Борна – Йордана к моей // *Ann. Phys.*, 1926, **79**, 734. Перевод изд.: *Шредингер Э.* Избранные труды по квантовой механике. М.: Наука, 1976. С. 56–74.
- [22] *Heisenberg W.* Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zs. Phys.*, 1927, **43**, 172–198. Перевод изд.: *Гейзенберг В.* О квантово-теоретическом истолковании кинематических и механических соотношений // *УФН*, 1977, **122**, 651–671.
- [23] *Born M.* Quantenmechanik der Stossvorgänge // *Zs. Phys.*, 1926, **38**, 803–827. Перевод изд.: *Борн М.* Квантовая механика процессов столкновений // *УФН*, 1977, **122**, 632–651.
- [24] *Bohr N.* The Structure of the Atom = Строение атома // *Nature*, 1923, **112**, 29–41. Перевод изд.: *Бор Н.* Избранные научные труды, Т. I. М.: Наука, 1970. С. 417–452.
- [25] *Landau L., Peierls R.* Extension of the Principle of Indeterminateness for the Relativistic Quantum Theory = Распространение принципа неопределенности на релятивистскую квантовую теорию // *Zs. Phys.*, 1931, **69**, 56. Перевод изд.: *Ландау Л. Д.* Собрание трудов, Т. 1 / под ред. Е. М. Лифшица. М.: Наука, 1969. С. 56–70.

- [26] *Ehrenfest P.* Bemerkung uber die angenaherte Gultigkeit der klassischen Mechanik innerhalb der Quanten Mechanik = Замечание о приближенной справедливости классической механики в рамках квантовой механики // *Zs. Phys.*, 1927, **45**, 455–457. Перевод изд.: *Эренфест П.* Относительность. Кванты. Статистика. М.: Наука, 1972. С. 82–84.
- [27] *Noether E.* Invariante Variationsprobleme = Инвариантные вариационные задачи. *Nachr. v. d. Konigl. Gesellsch. d. Wissensch. zu Gottingen, Math.-Phys. Kl.*, 1918, **2**, 235–258. Перевод изд.: Вариационные принципы механики // Сб. статей классиков науки / под ред. Л. С. Полака. М.: Физматгиз, 1959. С. 611–630.
- [28] *Bloch F.* Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern // *Zs. Phys.*, 1929, **52**, 555–600.
- [29] *Lee T., Yang C.* Question of Parity Conservation in Weak Interactions // *Phys. Rev.*, 1956, **104**, 254–258.
- [30] *Wu C.S., Ambler E., Hayward R.W. et al.* Experimental Test of Parity Conservation in Beta-Decay // *Phys. Rev.*, 1957, **105**, 1413–1415; Further Experiments on β -Decay of Polarized Nuclei // *Phys. Rev.*, 1957, **106**, 1361–1363.
- [31] *Lee T.D., Yang C.N.* Parity Nonconservation and a Two-Component Theory of Neutrino // *Phys. Rev.*, 1957, **105**, 1671–1675.
- [32] *Ландау Л. Д.* О законах сохранения при слабых взаимодействиях // *ЖЭТФ*, 1957, **32**, 405–407; On the Conservation Laws for Weak Interactions // *Nucl. Phys.*, 1957, **3**, 127–131.
- [33] *Christenson J.H., Cronin J.W., Fitch V.L., Turlay R.* Evidence for the 2π Decay of the K^0_2 Meson // *Phys. Rev. Lett.*, 1964, **13**, 138–140.
- [34] *Wood R.W.* A New Form of cathode Discharge and the Production of X-Rays, Together with Some Notes on Diffraction. Preliminary Communication // *Phys. Rev.*, 1897, **5**, 1–10.
- [35] *Fowler R.H., Nordheim L.* // *Proc. Roy. Soc. London*, **A**, 1928, **119**, 173–181.
- [36] *Mandelstam L., Leontowitsch M.* Zur Theorie der Schrödingerschen Gleichung = К теории уравнения Шредингера // *Zs. Phys.*, 1928, **47**, 131–136.
- [37] *Гамов Г. А.* Очерк развития учения о строении атомного ядра. Теория радиоактивного распада // *УФН*, 1930, **10**, Вып. 4, 531–544.
- [38] *Gurney R.W., Condon E.U.* Wave Mechanics and Radioactive Disintegration // *Nature*, 1928, **122**, 439.
- [39] *Binnig G., Rohrer H.* Scanning Tunneling Microscopy // *IBM J. Res. Develop.*, 1986, **30**, No. 4, 355–369.
- [40] *Woods A.D.B., Brockhouse B.N., March R.H. et al.* Crystal Dynamics of Sodium at 90 K // *Phys. Rev.*, 1962, **128**, 1112–1120.
- [41] *Woods A.D.B., Brockhouse B.N., Cowley R.A., Cochran W.* Lattice Dynamics of Alkali Halide Crystals. II. Experimental Studies of KBr and NaI // *Phys. Rev.*, 1963, **131**, 1025–1029.
- [42] *Gerlach W., Stern O.* Der experimentelle nachweis der richtungsquantelung im magnetfeld = Экспериментальное доказательство квантования направлений в магнитном поле // *Zs. Phys.*, 1922, **9**, 349–352.

- [43] *Uhlenbeck G.E., Goudsmit S.* Spinning Electrons and the Structure of Spectra // Nature, 1926, **117**, 264–265.
- [44] *Pauli W.* Zur Quantenmechanik des magnetischen Elektrons = К квантовой механике магнитного электрона // Zs. Phys., 1927, **43**, 601–623.
- [45] *Паули В.* Общие принципы волновой механики. М.–Л.: ОГИЗ, 1947. 332 с.
- [46] *Двайт Г. Б.* Таблицы интегралов и другие математические формулы. М.: Наука, 1978.
- [47] *Варшавович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.
- [48] *Эдмондс А.* Угловые моменты в квантовой механике // Деформация атомных ядер. М.: ИЛ, 1958. С. 305–351.
- [49] *Айзенбуд Л., Вигнер Е.* Структура ядра. М.: ИЛ, 1959.
- [50] *Генперт-Майер М., Иенсен И. Г. Д.* Элементарная теория ядерных оболочек. М.: ИЛ, 1958.
- [51] *Соловьев В. Г.* Теория атомного ядра. Ядерные модели. М.: Энергоиздат, 1981.
- [52] *Brillouin L.* Les électrons libres dans les métaux et le rôle des réflexions de Bragg // Journal de Physique et le Radium, 1930, **1**, No. 11, 377–400.
- [53] *Peierls R.* Zur Theorie der elektrischen und thermischen Leitfähigkeit von Metallen // Ann. Phys., 1930, **4**, 121–148.
- [54] *Kronig R.L., Penney W.G.* Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices // Proc. R. Soc. Lond. A, 1931, **130**, 499–513.
- [55] *Краснопевцев Е. А.* Квантовая механика в приложениях к физике твердого тела. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2010.
- [56] *Хирш П., Хови А., Николсон Р. и др.* Электронная микроскопия тонких кристаллов. М.: Мир, 1968.
- [57] *Stassis C., Oberteuffer J.A.* Neutron Diffraction by Perfect Crystals // Phys. Rev., 1974, **B10**, 5192–5202.
- [58] *Федоров В. В., Воронин В. В.* Динамическая дифракция и оптика нейтронов в совершенных кристаллах. Новые эффекты и их применение в физических исследованиях. Гатчина: Изд-во НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2022. 222 с.
- [59] *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. М.: Мир, 1979.
- [60] *Зельдович Я. Б.* Хранение холодных нейтронов // ЖЭТФ, 1959, **36**, 1952–1953.
- [61] *Серебров А. П.* Исследования фундаментальных взаимодействий в ПИЯФ НИЦ КИ с нейтронами и нейтрино на реакторах // УФН, 2015, **185**, № 11, 1179–1201.
- [62] *Федоров В. В.* Нейтронная физика. СПб.: Изд-во ПИЯФ РАН, 2004. 334 с.
- [63] *Shull C.G.* Observation of Pendellösung Fringe Structure in Neutron Diffraction // Phys. Rev. Lett., 1968, **21**, 1585–1589.
- [64] *Borrmann G.* Über Extinktionsdiagramme der Röntgenstrahlen von Quarz // Phys. Z., 1941, **42**, 157–162.

- [65] *Von Laue M.* Die Absorption der Röntgenstrahlen in Kristallen im Interferenzfall // Acta Crystallogr., 1949, **2**, 106–113.
- [66] *Вежлев Е. О., Воронин В. В., Кузнецов И. А. и др.* Эффект аномального поглощения нейтронов, дифрагирующих по Лауэ, при углах Брэгга, близких к $\pi/2$ // Письма в ЖЭТФ, 2012, **96**, Вып. 1, 3–7.

Содержание

Глава 1. Об истоках происхождения идеи о волновых свойствах частиц	3
1.1. Свет – это волна.....	3
1.2. Свет – поток частиц (корпускул).....	4
1.3. Излучение абсолютно черного тела	4
1.4. Фотоэффект.....	6
1.5. Комptonовское рассеяние фотонов заряженными частицами	7
1.6. Вывод формулы Дебая – Комптона.....	9
1.7. Волны де Бройля	11
1.8. Атом Резерфорда – Бора.....	12
1.9. Опыты Франка и Герца.....	14
1.10. Гипотеза де Бройля. Волновые свойства частиц	15
 Глава 2. Основные понятия квантовой механики. Уравнение Шредингера ..	18
2.1. Волна де Бройля свободной частицы. Уравнение Шредингера.....	18
2.2. Принцип суперпозиции состояний.....	20
2.3. Волновой пакет. Фазовая и групповая скорости.....	21
2.4. Соотношение неопределенностей	24
2.5. Свойства волновой функции и ее фурье-образа	26
2.6. Нормировочные интегралы. Уравнение неразрывности.....	28
2.7. Вероятностная интерпретация волновой функции.....	30
2.8. Причинность в квантовой механике	31
2.9. Стационарные состояния. Операторы энергии и импульса.....	32
2.10. Свободная частица в ограниченном объеме пространства.....	33
2.11. Вычисление средних значений координаты и импульса	37
2.12. Уравнение Шредингера для частицы в силовом поле.....	40
 Глава 3. Одномерные задачи квантовой механики	43
3.1. Свойства решений одномерного уравнения Шредингера	43
3.2. Прямоугольная потенциальная яма глубиной V_0 и шириной $2a$	45
3.3. Уровень в мелкой яме	51
3.4. Двухуровневая система.....	54
3.5. Осцилляции вероятности найти частицу в заданной яме	61
 Глава 4. Формализм квантовой механики.....	63
4.1. Векторы состояний в квантовой механике	63
4.2. Операторы физических величин. Эрмитовы операторы.....	69
4.3. Свойства собственных функции эрмитовых операторов.....	71
4.4. Операторы проецирования и представления волновой функции	73
4.5. Переход от одного представления к другому. Унитарные операторы	75
4.6. Матричное представление операторов	77
4.7. Действие оператора на вектор состояния в матричном представлении.....	78
4.8. Свойства унитарных преобразований.....	80
4.9. Одновременная измеримость величин и коммутаторы.....	81
4.10. Коммутаторы и соотношения неопределенностей	84

4.11. Основные постулаты квантовой механики.....	86
4.12. Простейшие операторы квантовой механики	87
4.13. Эволюция средних значений наблюдаемых величин с течением времени.....	89
4.14. Теорема Эренфеста	90
4.15. Теорема о вириале.....	92
4.16. Соотношение неопределенностей «время – энергия».....	93
Глава 5. Симметрии в физике и законы сохранения.....	95
5.1. Инвариантность гамильтониана и интегралы движения	95
5.2. Закон сохранения энергии.....	96
5.3. Представление Шредингера. Оператор эволюции. Функция Грина.....	97
5.4. Представление Гейзенберга	99
5.5. Представление взаимодействия.....	100
5.6. Закон сохранения импульса	102
5.7. Теорема Блоха.....	103
5.8. Закон сохранения момента импульса.....	103
5.9. Повороты осей координат в трехмерном пространстве. Генераторы поворота. Перестановочные соотношения	105
5.10. Дискретные преобразования	107
5.11. Инвариантность относительно инверсии координат (зеркальная симметрия).....	108
5.12. Четность и P -инвариантность	112
Глава 6. Переход от квантовой механики к классической.	
Квазиклассическое приближение	115
6.1. Отступление о принципе наименьшего действия в классической механике..	116
6.2. Условия перехода квантовой механики в классическую	117
6.3. Квазиклассическое приближение	119
6.4. Правила квантования Бора – Зоммерфельда	122
Глава 7. Решение квантовых задач для прямоугольных потенциалов	134
7. 1. Отражение частиц от скачка потенциала.....	134
7.2. Потенциальный барьер. Туннельный эффект	136
7.3. Холодная эмиссия электронов. Туннельный сканирующий микроскоп	140
7.4. Альфа-распад радиоактивных ядер. Закон Гейгера – Неттола.....	142
7.5. Квазистационарные состояния	147
7.5. Надбарьерное отражение.....	149
7.6. Эффект Рамзауэра	153
Глава 8. Гармонический осциллятор. Квантовая теория.....	154
8.1. Вариационный метод приближенных расчетов	154
8.2. Гармонический осциллятор. Вариационный метод.....	155
8.3. Линейный гармонический осциллятор. Представление чисел заполнения	159
8.4. Трехмерный осциллятор в декартовой системе координат	164

Глава 9. Фононы в одномерном кристалле.....	167
9.1. Система связанных осцилляторов и нормальные моды колебаний (классическое рассмотрение).....	167
9.2. Упругие волны в кристалле.....	173
9.3. Колебания атомов в одномерном кристалле (квантовая теория).....	177
9.4. Неупругое рассеяние нейтронов на фононах. Дисперсионные кривые	181
9.5. Два атома в ячейке. Оптическая ветвь колебаний	183
 Глава 10. Момент количества движения (угловой момент) в квантовой механике	 187
10.1. Операторы углового момента	187
10.2. Собственные значения и матричные элементы операторов углового момента.....	189
10.3. Орбитальный момент количества движения.....	192
10.4. Операторы орбитального момента в сферической системе координат	193
10.5. Внутренний момент количества движения – спин	197
10.6. Уравнение Шредингера для частицы во внешнем электромагнитном поле. Магнитный момент	200
10.7. Атом во внешнем магнитном поле.....	203
10.8. Открытие спина электрона.....	205
10.9. Уравнение Паули.....	206
10.10. Прецессия спина в магнитном поле. Представление Шредингера	207
10.11. Прецессия спина в магнитном поле. Представление Гейзенберга	209
 Глава 11. Движение частицы в центральном поле	 212
11.1. Уравнение Шредингера в сферических координатах.....	213
11.2. О физическом смысле центробежного потенциала	215
11.3. Асимптотическое поведение радиальной волновой функции при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$	216
11.4. Частица в сферической яме прямоугольной формы.....	219
11.5. Слабосвязанное основное состояние частицы	222
11.6. Состояния частицы с ненулевым орбитальным моментом	224
11.7. Кулоновское поле. Водородоподобный атом.....	227
11.8. Трехмерный изотропный гармонический осциллятор	235
 Глава 12. Приближенные методы квантовой механики. Теория возмущений	 242
12.1. Теория возмущений в стационарных состояниях с дискретным спектром	242
12.2. Теория возмущений при наличии двух близких уровней.....	244
12.3. Нестационарная теория возмущений	247
12.4. Эффективное сечение рассеяния	252
12.5. Рассеяние на сферически симметричном потенциальном барьере прямоугольной формы.....	254
12.5. Еще раз о задаче двух тел. Разделение переменных в относительных координатах	255

Глава 13. Системы тождественных частиц.....	260
13.1. Уравнение Шредингера для системы одинаковых частиц. Принцип неразличимости одинаковых частиц	260
13.2. Симметричные и антисимметричные волновые функции	263
13.3. Обменное взаимодействие	266
13.4. О сложении угловых моментов	270
13.5. Электроны в атоме. Периодическая система элементов	274
13.6. Оболочечная модель атомного ядра.....	280
13.7. Электроны в кристаллической решетке. Одномерный случай.....	293
 Глава 14. Рассеяние нейтронов кристаллами.	
Динамическая дифракция.....	309
14.1. Рассеяние нейтронов ядрами. Псевдопотенциал Ферми.....	309
14.2. Когерентное рассеяние нейтронов кристаллическим веществом	312
14.2. Обратное пространство. Векторы обратной решетки. Условие Вульфа – Брэгга.....	314
14.3. Разложение потенциала кристалла по векторам обратной решетки.....	318
14.4. Основные уравнения динамической дифракции	323
14.5. Нейтронная оптика (одноволновое приближение)	325
14.6. Двухволновая дифракция	328
14.6. Дифракция по Лауэ. Маятниковый эффект	332
14.7. Эффект аномальной прозрачности кристалла (эффект Бормана)	334
 Литература	338