

В. М. ГАЛИЦКИЙ, Б. М. КАРНАКОВ, В. И. КОГАН

ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

*Допущено Министерством высшего
и среднего специального образования СССР
в качестве учебного пособия
для студентов физических специальностей
высших учебных заведений*



МОСКВА «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
1981

22.31
Г 15
УДК 530.145

ГАЛИЦКИЙ В. М., КАРНАКОВ Б. М., КОГАН В. И. Задачи по квантовой механике: Учебное пособие. — М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1981.

Книга содержит 800 задач в основном по нерелятивистской квантовой механике, охватывающих как основные положения и математический аппарат теории, так и ее многочисленные приложения к атомной физике, физике ядра и частиц и физике многочастичных систем. Значительное внимание уделено расчетным методам квантовой механики: теории возмущений, квазиклассическому приближению, вариационному методу, приближению внезапных воздействий, адиабатическому приближению.

Две главы (из общего числа 16) включают задачи по элементарной квантовой теории излучения и релятивистским волновым уравнениям. Эти задачи являются полезным введением к изучению квантовой теории поля и физики элементарных частиц.

Рис. 42, библи. 13 назв.

Виктор Михайлович Галицкий, Борис Михайлович Карнаков, Владимир Ильич Коган

ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

М., 1981 г., 648 стр. с илл.

Редактор В. Я. Дубнова, Технический редактор В. Н. Кондакова
Корректоры Т. С. Плетнева, Н. Д. Дорохова

ИБ № 11503

Сдано в набор 29.05.80. Подписано к печати 03.02.81. Бумага 60×90¹/₁₆, тип. № 1
Литературная гарнитура. Высокая печать. Усл. печ. л. 40,5. Уч.-изд. л. 44,43. Тираж
19000 экз. Заказ № 670. Цена книги 1 р. 70 к.

Издательство «Наука» Главная редакция физико-математической литературы
117071, Москва, В-71, Ленинский проспект, 15

Ленинградская типография № 2 головное предприятие ордена Трудового Красного Знамени
Ленинградского объединения «Техническая книга» им. Евгении Соколовой Союзполиграф-
прома при Государственном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной
торговли. 198052, г. Ленинград, Л-52, Измайловский проспект, 29.

Г 20402—026
053(02)—81 96-80. 1704020000

© Издательство «Наука».
Главная редакция
физико-математической
литературы, 1981

СГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
Принятые сокращения	7
Наиболее часто используемые обозначения	7
Постоянные	8
	Задачи Решения
Глава 1. Операторы в квантовой механике	9 126
§ 1. Основные понятия теории линейных операторов	9 (126)
§ 2. Собственные функции, собственные значения, сред- ные	11 (130)
§ 3. Элементы теории представлений. Унитарные пре- образования	14 (138)
Глава 2. Одномерное движение	16 144
§ 1. Стационарные состояния дискретного спектра	16 (144)
§ 2. Состояния непрерывного спектра. Прохождение через потенциальные барьеры	23 (167)
Глава 3. Момент импульса	26 181
§ 1. Общие свойства момента	26 (181)
§ 2. Момент $L = 1$	29 (189)
§ 3. Сложение моментов	30 (194)
§ 4. Тензорный формализм в теории момента	34 (204)
Глава 4. Движение в центральном поле	36 208
§ 1. Системы с аксиальной симметрией	36 (208)
§ 2. Состояния дискретного спектра в центральных полях	38 (220)
Глава 5. Спин	43 240
§ 1. Формализм спина $s = 1/2$	43 (240)
§ 2. Пространственные состояния частицы со спином	47 (253)
Глава 6. Движение в магнитном поле	49 258
§ 1. Бесспиновая заряженная частица в магнитном поле	49 (258)
§ 2. Частица со спином в магнитном поле	52 (271)
§ 3. Магнитное поле орбитальных токов и спинового магнитного момента	53 (275)
Глава 7. Изменение состояния во времени	53 (280)
§ 1. Бесспиновые частицы	53 (280)
§ 2. Частицы со спином	58 (302)

	Задачи	Решения
Глава 8. Теория возмущений. Внезапные и адиабатические воздействия	60	309
§ 1. Стационарная теория возмущений	60	(309)
§ 2. Нестационарная теория возмущений. Переходы в непрерывном спектре	63	(325)
§ 3. Внезапные воздействия	66	(335)
§ 4. Адиабатическое приближение	67	(340)
Глава 9. Квазиклассическое приближение	69	349
§ 1. Квантование энергетических уровней. Квазиклассические волновые функции	69	(349)
§ 2. Прохождение через потенциальные барьеры	72	(373)
Глава 10. Тожественность частиц	74	382
§ 1. Симметрия волновых функций	74	(382)
§ 2. Основы формализма вторичного квантования	76	(391)
§ 3. Системы из большого числа $N \gg 1$ частиц	79	(400)
Глава 11. Атомы и молекулы	80	410
§ 1. Стационарные состояния атомов с одним и двумя электронами	80	(410)
§ 2. Многоэлектронные атомы	83	(428)
§ 3. Основные представления теории молекул	85	(439)
§ 4. Атомы и молекулы во внешних полях. Взаимодействие атомов и молекул	88	(449)
§ 5. Нестационарные явления в атомах и молекулах	92	(466)
Глава 12. Атомное ядро	94	476
§ 1. Основные представления о ядерных силах. Дейтрон	94	(476)
§ 2. Модель оболочек	97	(487)
Глава 13. Теория столкновений	100	501
§ 1. Борновское приближение	100	(501)
§ 2. Фазовая теория рассеяния. Рассеяние медленных частиц. Резонансные явления при рассеянии	103	(512)
§ 3. Рассеяние быстрых частиц (приближение эйконала). Рассеяние частиц со спином	105	(535)
§ 4. Рассеяние составных частиц. Неупругие столкновения	107	(542)
Глава 14. Квантовая теория излучения	109	552
§ 1. Излучение фотонов	109	(552)
§ 2. Рассеяние фотонов. Излучение фотонов при столкновениях	111	(566)
Глава 15. Релятивистские волновые уравнения	112	585
§ 1. Уравнение Клейна — Гордона	112	(585)
§ 2. Уравнение Дирака	115	(604)
Глава 16. Законы сохранения	118	622
§ 1. Кинематика распадов и столкновений	118	(622)
§ 2. Интегралы движения	120	(626)
§ 3. Сохранение момента и четности в распадах и столкновениях. Изотопические соотношения	122	(633)
Дополнение	647	
Литература	648	

ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемая книга содержит свыше 800 задач различной степени трудности в основном по нерелятивистской квантовой механике. Она предназначена для физиков — студентов и аспирантов, как экспериментаторов, так и теоретиков, изучающих квантовую механику по книгам Д. И. Блохинцева, А. С. Давыдова, Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица или другим руководствам соответствующего уровня.

При написании книги мы стремились уделить должное внимание как основам математического аппарата и физическим принципам квантовой механики, так и иллюстрации ее конкретных приложений — в основном к атомной физике, физике ядра и частиц — в той мере, в какой это можно сделать, не прибегая к специальным методам и представлениям этих областей физики. Наряду с более или менее традиционными задачами по квантовой механике книга содержит большое число оригинальных задач, отражающих развитие квантовой механики и ее многообразные физические приложения в последние десятилетия. Такой характер книги, по нашему мнению, должен сделать ее естественным дополнением к существующим учебным руководствам и лекционным курсам по квантовой механике.

Ко всем задачам, включенным в книгу, даны решения (при необходимости — достаточно подробные). Цель приведенных решений — помочь студенту в практическом применении полученных им общетеоретических знаний.

Книга является результатом развития и существенного расширения «Сборника задач по квантовой механике» В. И. Когана и В. М. Галицкого (Гостехиздат, 1956). Часть задач, приведенных в книге, опробована на семинарских занятиях, а также в индивидуальных заданиях для студентов в ходе многолетнего преподавания авторов на кафедре теоретической физики Московского инженерно-физического института, значительное число задач составлено непосредственно в процессе работы над книгой.

Для удобства пользования книгой составлен краткий список наиболее часто используемых обозначений, приведены числен-

ные значения ряда фундаментальных постоянных, необходимые для решения задач по физике атома и ядра, а также дополнение, в котором содержатся результаты решения квантовомеханических задач для линейного осциллятора, атома водорода и вид шаровых функций.

Мы надеемся, что книга будет полезной не только студентам, но и многим из тех, кто сталкивается с квантовой механикой в своей научной или педагогической деятельности.

Мы благодарны С. Т. Беляеву и В. Г. Соловьеву, прочитавшим книгу в рукописи, за ряд критических замечаний, способствовавших ее улучшению. Мы благодарны также многочисленным друзьям и коллегам по кафедре теоретической физики МИФИ за внимание и поддержку.

*В. М. Галицкий
Б. М. Карнаков
В. И. Коган*

Москва, февраль 1980

7 января 1981 г. незадолго до выхода в свет этой книги безвременно скончался член-корреспондент АН СССР Виктор Михайлович Галицкий. Это горестное событие почти совпало с выходом в свет и другой его книги — «Теория столкновений атомных частиц» (в соавторстве с Е. Е. Никитиным и Б. М. Смирновым).

В лице В. М. Галицкого советская теоретическая физика потеряла одного из своих выдающихся представителей, а мы, его соавторы, — учителя, друга, товарища по работе, вложившего в обе книги много своих идей и труда.

Пусть эти книги — частица творческого наследия Галицкого — помогут сохранить благодарную память об этом замечательном ученом, педагоге и человеке.

*Б. М. Карнаков
В. И. Коган
Е. Е. Никитин
Б. М. Смирнов*

Москва, январь 1981 г.

ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

- у. Ш. — уравнение Шредингера
 в. ф. — волновая функция
 с. ф. — собственная функция
 с. з. — собственное значение
 д. с. — дискретный спектр
 с. ц. и. — система центра инерции
 $\hat{}$ — символ оператора (матрицы), однако над оператором умножения он, как правило, не ставится
 \propto — знак пропорциональности
 \sim — знак порядка величины

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

НАИБОЛЕЕ ЧАСТО ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

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

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

$\Psi_n^{\text{осц}}$	— с. ф. линейного осциллятора
e	— заряд частицы *)
c	— скорость света
\hat{H}	— гамильтониан
E	— энергия
\mathcal{E}, \mathcal{H}	— напряженности электрического и магнитного полей
A	— векторный потенциал
U	— потенциальная энергия
\hat{V}	— оператор возмущения
d	— дипольный момент

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

a_0	— боровский радиус
δ_l	— фазовый сдвиг
$\hat{\sigma}$	— матрицы Паули
w, W	— вероятность перехода, вероятность перехода в единицу времени
Z, Ze	— заряд ядра
R	— радиус потенциала
m, M	— масса, магнитное квантовое число
μ	— масса, магнитный момент
p, P	— импульс
k	— волновой вектор
A	— массовое число ядра
ω	— частота
l, L, l, J	— момент (орбитальный и полный)
s, S	— спин
$J_\nu(z)$	— функция Бесселя
$H_n(x)$	— полином Эрмита
$Y_{lm}(\theta, \varphi)$	— шаровая функция

ПОСТОЯННЫЕ

Решение значительного числа задач по физике атома, молекулы и ядра предполагает проведение численных расчетов для сравнения результата решения с экспериментальными данными (приводимыми в условиях задач). Для удобства вычислений ниже приведены численные значения основных физических величин *).

Постоянная Планка $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-27}$ эрг·с
 Элементарный заряд $e = 4,80 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ
 Масса электрона $m_e = 9,11 \cdot 10^{-28}$ г
 Скорость света $c = 3,00 \cdot 10^{10}$ см/с
 Боровский радиус (ат. ед. длины) $a_0 = 0,53 \cdot 10^{-8}$ см
 Атомная единица энергии $m_e e^4 / \hbar^2 = 4,36 \cdot 10^{-11}$ эрг = 27,2 эВ
 Атомная единица частоты $m_e e^4 / \hbar^3 = 4,13 \cdot 10^{16}$ с⁻¹
 Атомная единица напряженности электрического поля $e/a_0^2 = 5,14 \cdot 10^9$ В/см
 Постоянная тонкой структуры $\alpha = e^2 / \hbar c = 1/137$
 Масса протона $m_p = 1836 m_e = 1,67 \cdot 10^{-24}$ г
 Разность масс нейтрона и протона $m_n - m_p \approx 2,5 m_e$
 Энергия покоя электрона $m_e c^2 = 0,51$ МэВ
 Радиус ядра $R \approx 1,2 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$ см
 1 эВ = $1,60 \cdot 10^{-12}$ эрг

*) Приведенные значения — приближенные; более точные значения см. в специальной литературе.

ЗАДАЧИ

Г л а в а 1

ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

§ 1. Основные понятия теории линейных операторов

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

а) отражения I : $I\Psi(x) \equiv \Psi(-x)$;

б) сдвига T_a : $T_a\Psi(x) \equiv \Psi(x+a)$;

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

г) комплексного сопряжения K : $K\Psi(x) \equiv \Psi^*(x)$.

Являются ли эти операторы линейными?

Найти вид операторов, которые по отношению к указанным являются: транспонированными, комплексно сопряженными, эрмитово сопряженными, обратными.

1.2. Для указанных ниже операторов найти операторы, которые по отношению к ним являются транспонированными, комплексно сопряженными, эрмитово сопряженными:

а) id/dx , $-\infty < x < +\infty$;

б) $i\partial/\partial r$, r — радиальная переменная сферической системы координат ($0 \leq r < \infty$).

1.3. Для произвольного линейного оператора \hat{L} ¹⁾ показать следующее:

а) $(L^+)^+ = L$;

б) операторы L^+L и LL^+ являются эрмитовыми.

в) операторы $L + L^+$ и $i(L - L^+)$ эрмитовы.

1.4. Показать, что если оператор \hat{C} эрмитов, то оператор $\hat{G} = \hat{A}\hat{C}\hat{A}^+$ также является эрмитовым.

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

1.6. Показать, что если операторы \hat{A} и \hat{B} эрмитовы, то операторы $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ и $i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ также эрмитовы.

¹⁾ В дальнейшем все рассматриваемые операторы предполагаются линейными и термин «линейный» для краткости опускается.

1.7. Оператор F неэрмитов. В каком случае оператор F^2 является эрмитовым?

1.8. Показать, что при алгебраических действиях с коммутаторами справедлив закон дистрибутивности, т. е. что коммутатор суммы равен сумме коммутаторов: $[\sum_i \hat{A}_i, \sum_k \hat{B}_k] = \sum_{i,k} [\hat{A}_i, \hat{B}_k]$.

1.9. Даны три оператора: \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} . Выразить коммутатор произведения $\hat{A}\hat{B}$ и \hat{C} через коммутаторы $[\hat{A}, \hat{C}]$ и $[\hat{B}, \hat{C}]$.

1.10. Доказать тождество Якоби для коммутаторов операторов \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} :

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0.$$

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

1.12. Оператор F вида $F = F(\hat{f})$, где $F(z)$ — некоторая функция переменной z , представимая в виде ряда $F(z) = \sum_n c_n z^n$, можно понимать как оператор, равный $\hat{F} \equiv \sum_n c_n \hat{f}^n$.

Используя это определение, найти явный вид следующих операторов:

$$a) \exp(i\pi\hat{I}); \quad б) \hat{T}_a = \exp\left(a \frac{d}{dx}\right)$$

(оператор \hat{I} определен в 1.1). В связи с данной задачей см. также 1.51.

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

1.14. Доказать следующее соотношение:

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

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

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

где $L(\xi, \xi')$ — ядро оператора \hat{L} (ξ — совокупность переменных используемого представления).

Как ядра операторов \hat{L}^* , \hat{L} , \hat{L}^+ связаны с ядром $L(\xi, \xi')$ оператора \hat{L} ? Найти ядра операторов \hat{I} , \hat{M}_c , \hat{T}_a , $\hat{x} \equiv x$, $\hat{p} \equiv -i\hbar d/dx$. Операторы \hat{I} , \hat{M}_c , \hat{T}_a определены в 1.1.

1.16. Ядро $L(x, x')$ оператора \hat{L} является функцией вида:

$$a) L = f(x + x'); \quad б) L = f(x - x'); \quad в) L = f(x)g(x').$$

Какие ограничения на функции $f(x)$ и $g(x)$ вытекают из эрмитовости оператора \hat{L} ?

1.17. Какой вид имеет ядро $L(x, x')$ оператора \hat{L} , если этот оператор коммутирует с оператором:

$$a) \text{ координаты } \hat{x} \equiv x; \quad б) \text{ импульса } \hat{p} \equiv -i\hbar d/dx?$$

1.18. Показать, что оператор \hat{F} , коммутирующий с операторами \hat{x} и \hat{p} (в одномерном случае), кратен единичному, т. е. $\hat{F} \equiv F_0 = \text{const}$.

§ 2. Собственные функции, собственные значения, средние

1.19. В состоянии, описываемом волновой функцией вида

$$\Psi(x) = C \exp\left[\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right],$$

где p_0, x_0, a — вещественные параметры, найти функцию распределения по координатам частицы. Определить средние значения и флуктуации координаты и импульса частицы.

1.20. Волновая функция состояния частицы имеет вид

$$\Psi(x) = C \exp(ip_0x/\hbar) \varphi(x),$$

$\varphi(x)$ — вещественная функция. Показать, что p_0 — средний импульс частицы в рассматриваемом состоянии.

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

1.22. Показать, что средние значения эрмитовых операторов $\hat{L} + \hat{L}$ и $\hat{L}\hat{L}^+$ (\hat{L} — некоторый линейный оператор) в произвольном состоянии неотрицательны.

1.23. Показать, что собственные значения оператора квадрата любой физической величины неотрицательны.

1.24. Эрмитов оператор \hat{f} удовлетворяет соотношению $\hat{f}^2 = c\hat{f}$, где c — некоторое вещественное число. Каковы собственные значения такого оператора?

1.25. Найти собственные функции и собственные значения физической величины, представляющей линейную комбинацию одноименных компонент импульса и координаты: $\hat{f} = \alpha\hat{p} + \beta\hat{x}$. Убедиться в ортогональности полученных функций и нормировать их соответствующим образом. Рассмотреть предельные случаи: $\alpha \rightarrow 0$; $\beta \rightarrow 0$.

1.26. Найти собственные значения и собственные функции эрмитова оператора \hat{F} , ядро которого имеет вид $F(x, x') = \hat{f}(x)\hat{f}^*(x')$. Какова кратность вырождения собственных значений этого оператора?

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

1.28. Эрмитов оператор $\hat{f}(\lambda)$, обладающий дискретным спектром собственных значений, зависит от некоторого параметра λ .

Доказать соотношение

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \overline{\frac{\partial \hat{f}(\lambda)}{\partial \lambda}},$$

в котором индекс n нумерует собственные значения, а усреднение в правой части равенства проводится по состоянию $\Psi_n(\lambda; q)$ *).

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

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

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

где все средние значения, входящие в приведенное выражение, относятся к одному и тому же, произвольному состоянию системы.

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

1.31. В состоянии квантовомеханической системы, описываемой волновой функцией Ψ_A , физическая величина A имеет определенное значение. Имеет ли в этом состоянии определенное значение также и величина B в случаях, если операторы \hat{A} и \hat{B} : а) не коммутируют; б) коммутируют?

1.32. Показать, что операторы компонент радиуса-вектора $\hat{\mathbf{r}}$ и импульса $\hat{\mathbf{p}}$ частицы антикоммутируют с оператором отражения \hat{I} , а операторы компонент момента $\hat{\mathbf{L}}$ коммутируют с \hat{I} .

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

1.34. Как известно, эрмитовы операторы (точнее, самосопряженные) обладают следующими свойствами: собственные значения таких операторов — вещественные числа; собственные функции, отвечающие различным собственным значениям, ортого-

*) В общем случае, когда спектр собственных значений $\hat{f}(\lambda)$ состоит из дискретной и непрерывной частей, утверждение задачи сохраняется для дискретной части спектра.

нальны и образуют полную систему. Если же линейный оператор не является эрмитовым, то его собственные значения и собственные функции могут обладать самыми различными свойствами. Следующие ниже примеры, в которых требуется найти собственные значения и собственные функции указанных неэрмитовых операторов и выяснить их свойства, иллюстрируют эти различные возможности:

$$а) x - d/dx; \quad б) x + d/dx; \quad в) \hat{a} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad г) \hat{b} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

1.35. Проекционным оператором $\hat{P}(f_i)$, проектирующим на состояния с определенным значением f_i физической величины f , называют линейный оператор, действие которого на функции Ψ_{f_k} состоит в следующем:

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

Показать, что оператор $\hat{P}(f_i)$ обладает свойствами:

а) $\hat{P}(f_i)$ — эрмитов оператор; б) $\hat{P}^2(f_i) = \hat{P}(f_i)$.

Можно также говорить о проекционных операторах $\hat{P}(\{f\})$, проектирующих на состояния, в которых физическая величина f имеет не одно определенное значение f_i , а принимает какое-либо значение из некоторого набора $\{f\} = \{f_i, f_{i_2}, \dots\}$. При этом сохраняются указанные выше свойства проекционных операторов. В частности, оператор $\hat{P} = \hat{I} - \hat{P}(f_i)$ также является проекционным. На какие состояния проектирует этот оператор?

Отметим, что понятие проекционного оператора очевидным образом может быть обобщено на случай, когда в роли f_i выступает совокупность физических величин, составляющих часть полного набора (или весь полный набор).

1.36. Какой физический смысл имеет среднее значение проекционного оператора $\hat{P}(f_i)$ в произвольном состоянии, описываемом волновой функцией Ψ ?

1.37. Найти оператор, проектирующий на состояния, в которых координата частицы удовлетворяет условию $x \geq 0$.

1.38. Найти проекционные операторы \hat{P}_{\pm} , проектирующие на четные \hat{P}_+ и нечетные \hat{P}_- относительно инверсии координат состояния частицы.

1.39. Показать, что эрмитов оператор \hat{F} , рассмотренный в задаче 1.26, умножением на некоторую постоянную величину c может быть превращен в проекционный оператор: $\hat{P} = c\hat{F}$. На какое состояние проектирует оператор \hat{P} ?

1.40. Эрмитов оператор \hat{f} имеет N различных собственных значений. Найти вид проекционного оператора $\hat{P}(f_i)$ на состояния с заданным значением f_i величины f .

§ 3. Элементы теории представлений. Унитарные преобразования

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

1.42. Найти в импульсном представлении волновую функцию состояния частицы, рассмотренного в 1.19.

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

1.44. Найти вид операторов отражения \hat{I} и сдвига \hat{T}_a в импульсном представлении.

1.45. Показать, что при переходе от координатного представления к импульсному четность волновой функции относительно ее (соответствующего) аргумента остается неизменной.

1.46. Как известно, произвольный линейный оператор в общем случае является интегральным оператором. Установить соотношение между $L(x, x')$ и $L(p, p')$ — ядрами одного и того же оператора \hat{L} в x - и p -представлениях.

1.47. Найти вид операторов \hat{r}^{-1} и \hat{r}^{-2} в импульсном представлении. Проверить равенство $\widehat{r^{-2}} = \widehat{r^{-1}}\widehat{r^{-1}}$.

1.48. Даны два эрмитовых оператора \hat{A} и \hat{B} . Указать связь между собственными функциями оператора \hat{A} в B -представлении и собственными функциями оператора \hat{B} в A -представлении. В качестве иллюстрации полученного результата рассмотреть операторы \hat{x} и \hat{p} .

1.49. Обозначим через $\Psi_i \equiv \Psi_{\lambda_i}$ нормированные соответствующим образом волновые функции полного набора λ . Выразить через матричные элементы $f_{ik} = \int \Psi_i^* \hat{f} \Psi_k d\tau$ произвольного оператора \hat{f} :

а) результат действия оператора \hat{f} на функции Ψ_i ;

б) результат действия оператора \hat{f} на волновую функцию произвольного состояния в λ -представлении.

Сравнить полученные результаты.

1.50. Каков вид проекционного оператора $\hat{P}(f_i)$ на состояние с определенным значением f_i физической величины f в f -представлении?

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

Показать, что если функция $F(z)$ представима в виде ряда $F(z) = \sum_n c_n z^n$, то оператор \hat{F} , введенный в этой задаче, совпадает с оператором \hat{F} из 1.12.

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

1.53. Найти явный вид оператора $\hat{F} = F(\hat{P})$, где $F(z)$ — заданная функция, \hat{P} — некоторый проекционный оператор.

1.54. Какие из операторов, рассмотренных в 1.1 и 1.2, являются унитарными?

1.55. Унитарный оператор удовлетворяет уравнению $O^2 = O$. Найти явный вид этого оператора.

1.56. Оператор O — унитарный. В каком случае оператор $O' = cO$, где c — некоторое число, также является унитарным оператором?

1.57. Показать, что произведение $O_1 O_2$ двух унитарных операторов является унитарным оператором.

1.58. Может ли унитарный оператор (матрица) являться одновременно и эрмитовым? В качестве примера рассмотреть оператор инверсии \hat{I} .

1.59. Показать, что оператор вида $O = \exp(i\hat{F})$ является унитарным, если \hat{F} — эрмитов оператор.

1.60. Показать, что если \hat{A} и \hat{B} — коммутирующие друг с другом эрмитовы операторы, то оператор

$$\hat{U} = \frac{\hat{A} + i\hat{B}}{\hat{A} - i\hat{B}}$$

является унитарным. Представить в указанном виде унитарный оператор $O = \exp(i\hat{F})$ (см. 1.59).

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

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

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

1.62. Квадратные матрицы \hat{A} и \hat{A}' одного ранга связаны унитарным преобразованием $\hat{A}' = O\hat{A}O^+$. Показать, что шпуры и детерминанты этих матриц — одинаковые.

1.63. Чем примечателен детерминант унитарной матрицы? Показать, что, используя преобразование унитарной матрицы вида $O' = cO$, рассмотренного в 1.56, унитарную матрицу можно сделать унимодулярной, т. е. $\det O' = 1$.

1.64. Найти детерминант унитарной матрицы вида $O = \exp(i\hat{F})$, где \hat{F} — эрмитова матрица.

1.65. Сколько имеется независимых квадратных матриц ранга N , которые являются: а) эрмитовыми; б) унитарными? Каково число унимодулярных унитарных матриц ранга N ?

1.66. Переход от одного представления к другому можно рассматривать как унитарное преобразование. Убедиться в этом на примере перехода от x -представления к p -представлению.

1.67. Найти закон преобразования операторов \hat{x} и \hat{p} при унитарных преобразованиях, осуществляемых операторами:

а) отражения \hat{I} ; б) сдвига \hat{T}_a ; в) изменения масштаба \hat{M}_c . Операторы \hat{I} , \hat{T}_a , \hat{M}_c введены в 1.1.

Г л а в а 2

ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

§ 1. Стационарные состояния дискретного спектра

2.1. Найти энергетические уровни и нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a , т. е.

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

Выяснить свойства симметрии полученных функций при инверсии координат относительно центра ямы (преобразование вида $x \rightarrow x' = -x + a$).

2.2. В стационарных состояниях частицы из предыдущей задачи найти функцию распределения по координатам и импульсам частицы, средние значения этих величин и их флуктуации.

2.3. Найти среднюю кинетическую энергию и ее флуктуацию в стационарных состояниях из 2.1.

2.4. Состояние частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$) описывается волновой функцией вида:

$$а) \Psi(x) = Ax(x - a); \quad б) \Psi(x) = B \sin^2(\pi x/a).$$

Найти распределение вероятностей различных значений энергии частицы, среднее значение и среднюю квадратичную флуктуацию энергии.

2.5. Для частицы из задачи 2.1 определить вид операторов координаты и импульса в энергетическом представлении.

2.6. Найти изменение энергетических уровней и волновых функций стационарных состояний заряженного линейного осциллятора при наложении на него однородного электрического поля, направленного вдоль оси колебаний.

2.7. Найти четные и нечетные энергетические уровни дискретного спектра частицы в симметричной потенциальной яме вида (рис. 1)

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

Каково число состояний частицы в дискретном спектре в зависимости от глубины ямы? Каково условие появления новых состояний дискретного спектра при углублении ямы?

Найти энергетические уровни нижней части спектра в случае глубокой потенциальной ямы $U_0 \gg \hbar^2/ma^2$ и определить смещение этих уровней по сравнению с энергетическими уровнями частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме (см. 2.1).

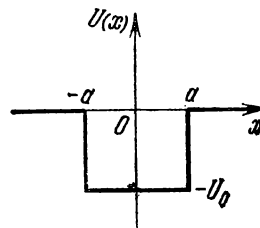


Рис. 1.

2.8. Рассмотреть симметричную потенциальную яму (см. предыдущую задачу) малой глубины $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$. Показать, что в такой яме имеется один уровень дискретного спектра, и получить приближенные выражения для энергии и нормированной волновой функции этого состояния. Найти средние значения $\overline{U(x)}$ и $T = \overline{p^2/2m}$.

2.9. Используя результат предыдущей задачи, найти функции распределения по координатам и импульсам частицы в основном состоянии в мелкой потенциальной яме. Определить вероятность нахождения частицы в яме. Вычислить произведение неопределенностей координаты и импульса.

2.10. Потенциальная энергия имеет вид $U(x) = U(x) + \alpha\delta(x - x_0)$, где $U(x)$ — ограниченная функция. Как ведут себя решение $\Psi(x)$ уравнения Шредингера и его производная в окрестности точки x_0 ?

2.11. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции состояний дискретного спектра частицы в поле $U(x) = -\alpha\delta(x)$, $\alpha > 0$ (рис. 2). Найти средние значения кинетической и потенциальной энергии в этих состояниях. Сравнить с результатом задачи 2.8.

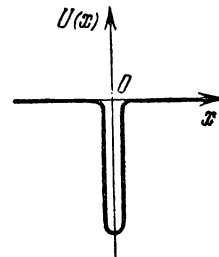


Рис. 2.

2.12. Найти соответствие между энергетическими уровнями дискретного спектра и нормированными волновыми функциями стационарных состояний частицы в полях $U(x)$ и $\tilde{U}(x)$, связанных между собой следующим образом:

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

причем потенциал $U(x)$ симметричен, т. е. $U(x) = U(-x)$ (рис. 3).

2.13. Используя вариационный принцип, показать, что в любом поле $U(x)$, удовлетворяющем условиям: $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow$

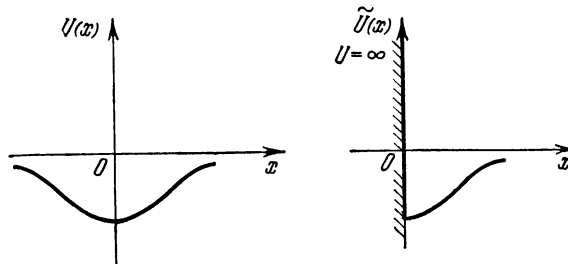


Рис. 3.

$\rightarrow \pm \infty$ и $\int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx < 0$, всегда имеется хотя бы одно состояние дискретного спектра.

2.14. Частица находится в поле вида $U(x) = U_0 f(x/a)$. Найти зависимость энергетических уровней E_n и средних значений \bar{x} , $(\Delta x)^2$ в стационарных состояниях дискретного спектра от параметра поля U_0 (или a) при условии $ma^2 U_0 / \hbar^2 = \text{const}$.

2.15. Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии частицы в однородном поле тяжести g для случая, когда движение частицы ограничено снизу идеально отражающей плоскостью.

2.16. Найти энергию E_0 и волновую функцию основного состояния частицы в поле $U(x) = -U_0 \exp(-|x|/a)$. Специально рассмотреть случай мелкой ямы $ma^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$; сравнить с результатом задачи 2.11.

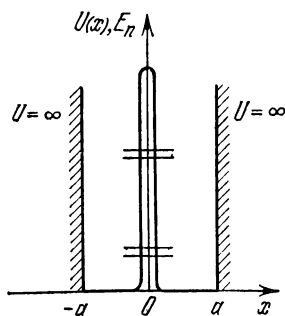


Рис. 4.

2.17. Найти энергетические уровни частицы в поле $U(x)$ вида

$$U(x) = \begin{cases} \alpha \delta(x), & \alpha > 0, \quad |x| < a, \\ \infty, & |x| > a. \end{cases}$$

При выполнении условия $m\alpha a / \hbar^2 \gg 1$ исследовать структуру уровней нижней части спектра. Показать, что энергетический спектр состоит из последовательности пар близко расположенных уровней, и найти расстояние между этими близко расположенными уровнями (рис. 4).

Каков спектр сильно возбужденных состояний частицы?

Какова картина энергетических уровней при $\alpha < 0$?

2.18. Частица находится в потенциальной яме $U(x)$, удовлетворяющей условию: $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$. Исследовать поведение решения уравнения Шредингера при $x \rightarrow \pm\infty$ в случае $E = 0$.

Показать, что не возрастающее при $x \rightarrow \pm\infty$ решение $\Psi_{E=0}$ уравнения Шредингера существует только при определенных параметрах потенциала, отвечающих появлению новых состояний дискретного спектра при углублении потенциала.

Применить полученный результат к полю вида

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > 2a, \\ -U_0, & 0 < x < 2a. \end{cases}$$

Сравнить с результатом задачи 2.7.

2.19. Для частицы в поле $U(x)$ вида (рис. 5)

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ -\alpha\delta(x-a), & x > 0, \end{cases}$$

найти зависимость числа состояний дискретного спектра от параметра $\xi = m\alpha a/\hbar^2$.

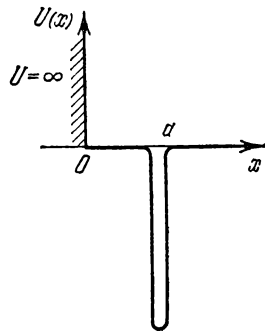


Рис. 5.

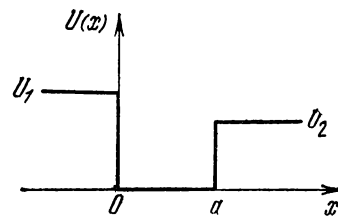


Рис. 6.

2.20. Для частицы в поле $U(x)$ вида (рис. 6)

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ U_2, & x > a, \end{cases}$$

найти условие существования состояний дискретного спектра.

Рассмотреть предельные случаи: а) $U_1 = \infty$; б) $U_1 = U_2$.

2.21. Показать, что среднее значение силы, действующей на частицу в стационарном состоянии дискретного спектра, равно нулю.

2.22. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме. Вычислить среднюю силу, с которой частица действует

на каждую из стенок ямы в стационарных состояниях. Сравнить с результатом классической механики.

2.23. То же, что и в предыдущей задаче, но для основного состояния частицы в мелкой потенциальной яме (см. 2.8).

Задачу предлагается решить двумя способами:

а) используя метод решения предыдущей задачи; б) непосредственно усредняя оператор силы.

2.24. Частица находится в поле $U(x)$ вида

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

Выразить среднюю силу, с которой частица действует на стенку $x=0$ в стационарном состоянии дискретного спектра, через значение $\Psi'_n(0)$ нормированной волновой функции.

Применить полученный результат к случаю частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме, и сравнить с задачей 2.22.

2.25. Частица находится в поле, имеющем вид двух одинаковых потенциальных ям, расположенных на некотором расстоянии друг от друга так, что потенциальная энергия имеет вид, указанный на рис. 7 ($U(0) = 0$).

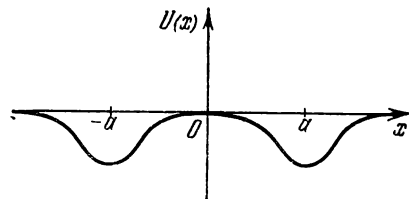


Рис. 7.

Показать, что средняя сила, с которой частица действует на ямы в стационарных состояниях дискретного спектра, приводит эффективно к взаимному притяжению ям в четных состояниях и к их взаимному отталкиванию в нечетных состояниях.

2.26. Получить приближенное значение энергии основного состояния частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$) вариационным методом, используя пробные функции вида:

а) $\Psi(x) = Ax(x-a)$; б) $\Psi(x) = B \sin^2(\pi x/a)$; в) $\Psi(x) = C(a/2 - |x - a/2|)$.

Сравнить с точным значением. Объяснить, почему именно пробная функция вида а) дает результат, наиболее близкий к точному.

2.27. Найти приближенное значение энергии основного состояния гармонического осциллятора вариационным методом, используя пробные функции вида:

а) $\Psi(x) = A(1 + x^2/a^2)^{-1}$; б) $\Psi(x) = B(1 + x^2/a^2)^{-2}$, где a — вариационный параметр. Сравнить с точным значением.

Если рассмотреть пробную функцию вида $\Psi(x) = A(1 + x^2/a^2)^{-\nu}$ (a и ν — вариационные параметры), то при каком выборе этих параметров вариационный расчет даст наилучшее приближение?

2.28. Используя пробные функции вида, приведенного в предыдущей задаче, найти вариационным методом энергию основного состояния частицы в поле $U(x) = -\alpha\delta(x)$. Сравнить с точным решением.

2.29. Для частицы, находящейся в поле $U(x)$ вида

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

найти энергию основного состояния вариационным методом, используя пробные функции вида ($x > 0$):

а) $\Psi(x) = Ax \exp(-\alpha x)$; б) $\Psi(x) = Bx \exp(-\alpha x^2/2)$ (α — вариационный параметр). Сравнить с точным значением (см. 2.15).

2.30. Получить приближенное значение энергии первого возбужденного состояния частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$); аппроксимируя волновую функцию этого состояния полиномом третьей степени, удовлетворяющим необходимым граничным условиям. Сравнить с точным значением.

2.31. Используя пробную функцию вида $\Psi(x) = Ax \exp(-\alpha|x|)$ (α — вариационный параметр), найти энергию первого возбужденного состояния гармонического осциллятора. Сравнить с точным значением.

2.32. Для частицы, находящейся в поле $U(x)$ вида, приведенного в 2.19, найти вариационным методом значения параметров потенциала, при которых в поле имеется состояние дискретного спектра. При расчетах использовать пробные функции вида ($x > 0$):

$$а) \Psi(x) = Ax \exp(-\kappa x); \quad б) \Psi(x) = Bx \exp(-\kappa x^2/2).$$

Сравнить полученные результаты с точным решением.

2.33. Найти в импульсном представлении вид стационарного уравнения Шредингера для частицы, находящейся в поле $U(x)$.

2.34. Найти энергетический уровень и нормированную волновую функцию состояния дискретного спектра в поле $U(x) = -\alpha\delta(x)$ из решения уравнения Шредингера в импульсном представлении.

Сравнить с результатом задачи 2.11.

2.35. Найти энергетический спектр и нормированные волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора в импульсном представлении, исходя из решения уравнения Шредингера в этом представлении.

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

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

С помощью функции Грина записать уравнение Шредингера для состояний дискретного спектра в поле $U(x)$, ($U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$) в виде интегрального уравнения.

2.37. Найти энергетический уровень E_0 и нормированную волновую функцию $\Psi_0(x)$ основного состояния частицы в поле $U(x) = -\alpha\delta(x)$ из решения уравнения Шредингера в интегральной форме (см. предыдущую задачу). Сравнить с 2.11.

2.38. Используя результат из 2.36, показать, что значения энергетических уровней E_n дискретного спектра частицы в произвольном поле $U(x) \leq 0$ ($U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$) удовлетворяют условию

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

В каких случаях достигается равенство (или приближенное равенство) в этом соотношении? В качестве иллюстрации полученного результата см. задачи 2.8 и 2.16.

2.39. Найти функцию Грина уравнения Шредингера для свободной частицы, движение которой ограничено непроницаемой потенциальной стенкой (рис. 8), т. е.

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

при отрицательной энергии ($E < 0$). Функция Грина удовлетворяет граничному условию $G_E(x=0, x') = 0$ и убывает при $|x - x'| \rightarrow \infty$.

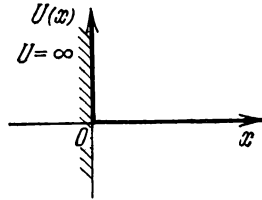


Рис. 8.

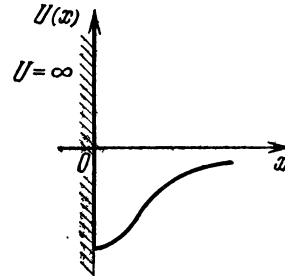


Рис. 9.

2.40. Используя интегральную форму уравнения Шредингера, показать, что условие

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

является *необходимым* условием существования состояний дискретного спектра в поле $U(x)$ вида (рис. 9)

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

Применить полученный результат к случаю

$$\tilde{U}(x) = \begin{cases} -U_0, & 0 < x < a, \\ 0, & x > a, \end{cases}$$

и сравнить с точным условием.

2.41. Найти функцию Грина $G_E(x, x')$ частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$).

Обсудить аналитические свойства функции Грина G_E как функции переменной E . Показать, в частности, что она имеет полюсы, и установить соответствие положений этих полюсов в плоскости комплексной переменной E с энергетическими уровнями E_n частицы в яме.

2.42. Рассмотрим потенциальные ямы различного вида $U(x)$, удовлетворяющие условиям:

$$U(x) \leq 0; \quad U(x) \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \pm \infty; \quad \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx = \alpha = \text{const.}$$

Какой конкретный вид имеет потенциальная яма, в которой:
 а) глубина энергетического уровня $|E_0|$ принимает максимальное значение; б) содержится наибольшее число состояний дискретного спектра, возможное в полях $U(x)$, удовлетворяющих указанным выше условиям?

§ 2. Состояния непрерывного спектра. Прохождение через потенциальные барьеры

2.43. Для свободной частицы, движение которой ограничено непроницаемой стенкой, т. е.

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

найти волновые функции стационарных состояний. Нормировать их на δ -функцию по энергии. Убедиться в полноте полученной системы функций на интервале $x > 0$.

2.44. Найти волновые функции стационарных состояний частицы в поле (рис. 10)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & x > 0 \quad (U_0 > 0), \end{cases}$$

для случая, когда энергия частицы E меньше высоты потенциальной стенки U_0 . Убедиться в ортогональности полученных функций и нормировать их на δ -функцию по энергии. Образуют ли полученные функции полную систему?

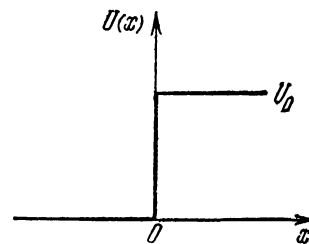


Рис. 10.

2.45. Исходя из решения уравнения Шредингера в импульсном представлении, найти волновые функции стационарных со-

стояний частицы в однородном поле $U(x) = -F_0x$. Нормировать их на δ -функцию по энергии и убедиться в полноте полученной системы функций.

2.46. Определить коэффициент отражения частиц от потенциальной стенки из 2.44 при энергии частиц $E > U_0$.

Рассмотреть предельные случаи $E \rightarrow \infty$ и $E \rightarrow U_0$.

2.47. Определить коэффициенты прохождения и отражения частиц в случае δ -функционального потенциала $U(x) = \alpha\delta(x)$ (рис. 11). Рассмотреть предельные случаи $E \rightarrow \infty$ и $E \rightarrow 0$.

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

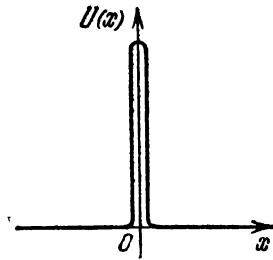


Рис. 11.

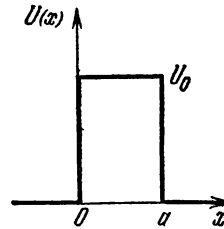


Рис. 12.

2.48. Найти коэффициент прохождения частиц через прямоугольный потенциальный барьер (рис. 12)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \text{ и } x > a, \\ U_0, & 0 < x < a \quad (U_0 > 0). \end{cases}$$

Специально обсудить следующие частные случаи:

- а) $E \rightarrow \infty$ (фактически $E \gg U_0$);
- б) случай барьера малой прозрачности $(U_0 - E)ma^2/\hbar^2 \gg 1$;
- в) $E \rightarrow 0$ (фактически $E \ll ma^2U_0/\hbar^2$ и $E \ll U_0$);
- г) $ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$ и $ma^2E/\hbar^2 \ll 1$.

В последнем случае сравнить с результатом предыдущей задачи.

2.49. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае потенциальной ямы.

2.50. Найти значения энергий, при которых частицы не отражаются от потенциального барьера вида (рис. 13)

$$U(x) = \alpha [\delta(x) + \delta(x - a)].$$

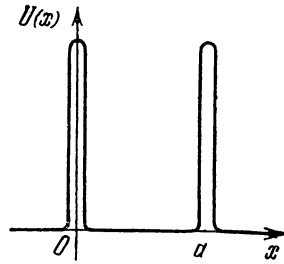


Рис. 13.

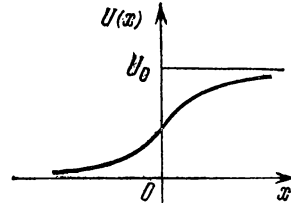


Рис. 14.

2.51. Найти коэффициенты прохождения и отражения частиц в случае потенциала вида (потенциальная ступенька, см. рис. 14)

$$U(x) = \frac{U_0}{1 + \exp(-x/a)}, \quad U_0 > 0, \quad a > 0.$$

Рассмотреть предельные случаи $E \rightarrow \infty$ и $E \rightarrow U_0$.

2.52. Определить коэффициент прохождения частиц через потенциальный барьер вида

$$U(x) = U_0 / \operatorname{ch}^2(x/a), \quad U_0 > 0.$$

Специально обсудить следующие предельные случаи:

- а) слабое поле $\xi \equiv ma^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$ и медленные частицы $ka \ll 1$;
- б) слабое поле и не очень медленные частицы $ka \gtrsim 1$;
- в) барьер малой прозрачности $\xi \gg 1$ и быстрые частицы $ka \gg 1$;
- г) барьер малой прозрачности и $|E - U_0| \ll U_0$;
- д) барьер малой прозрачности и $E \rightarrow 0$;
- е) барьер (или яма) произвольной величины и $E \rightarrow \infty$.

(Такой подробный анализ различных предельных случаев предлагается провести с той целью, чтобы в дальнейшем продемонстрировать на примере рассматриваемого потенциала применение приближенных методов (теории возмущений и квазиклассического), а также ряда общих результатов теории прохождения частиц через потенциальные барьеры.)

2.53. Найти коэффициент прохождения частиц через потенциальный барьер вида (рис. 15)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0(1 - x/a), & x > 0 \end{cases} \quad (U_0 > 0, \quad a > 0).$$

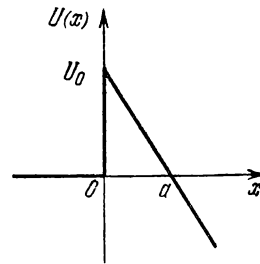


Рис. 15.

Специально обсудить случай барьера малой прозрачности $\xi \equiv (2ma^2U_0/\hbar^2)^{1/2} \gg 1$ при энергиях частиц, удовлетворяющих условию $\xi|E - U_0|/U_0 \gg 1$.

2.54. Показать, что для барьера произвольной формы автоматически выполняется соотношение

$$R(E) + D(E) = 1,$$

где R — коэффициент отражения, D — коэффициент прохождения частиц.

2.55. Показать, что для барьера произвольной формы коэффициент прохождения (и отражения) частиц с данной энергией E не зависит от того, с какой стороны частицы падают на барьер.

2.56. Поле $U(x)$ имеет вид потенциальной ступеньки, т. е. $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow -\infty$ и $U(x) \rightarrow U_0 > 0$ при $x \rightarrow \infty$. Найти энергетическую зависимость коэффициента прохождения частиц при $E \rightarrow U_0$ (иллюстрацией результата могут служить задачи 2.46, 2.51, 2.53).

2.57. Найти функции Грина $G_E^{(\pm)}(x, x')$ уравнения Шредингера для свободной частицы при энергиях $E > 0$. Индексы (\pm) у функций Грина означают, что они имеют асимптотику $G_E^{(\pm)} \sim \exp\left(\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} |x - x'|\right)$ при $|x - x'| \rightarrow \infty$.

Используя полученный результат, представить уравнение Шредингера в виде интегрального уравнения, решения которого описывают процесс отражения и прохождения частиц с импульсом p в поле $U(x)$, удовлетворяющем условиям: $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$.

2.58. Используя результат предыдущей задачи, найти коэффициенты прохождения и отражения частиц в поле $U(x) = \alpha\delta(x)$. Сравнить с решением 2.47.

2.59. На основании результата 2.57 получить выражения для коэффициентов прохождения и отражения частиц в поле $U(x)$, обращаемом в нуль при $x \rightarrow \pm\infty$, через волновую функцию $\Psi_p(x)$ в области действия потенциала.

Г л а в а 3

МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

§ 1. Общие свойства момента

3.1. Выразить оператор поворота $\hat{R}(\varphi_0)$, описывающий преобразование волновой функции системы N частиц при вращении системы координат на угол φ_0 относительно оси, направление которой в пространстве определяется единичным вектором \mathbf{n}_0 , через оператор момента системы.

Является ли оператор $\hat{R}(\varphi_0)$: а) эрмитовым? б) унитарным?

3.2. Дать простую интерпретацию коммутативности операторов проекций импульса и некоммутативности операторов проекций момента импульса, исходя из кинематического смысла этих операторов, связанного с бесконечно малыми переносами и поворотами.

3.3. Показать, что равенство $L^2 = l(l+1)$ получается с помощью элементарных формул теории вероятностей, исходя из того, что возможные проекции момента на произвольную ось равны m ($m = -l, -l+1, \dots, l$) и все эти значения проекции момента равновероятны, а оси равноправны.

3.4. Найти следующие коммутаторы:

- а) $[\hat{L}_i, \hat{r}^2]$, $[\hat{L}_i, \hat{p}^2]$, $[\hat{L}_i, (\hat{p}\hat{r})]$, $[\hat{L}_i, (\hat{p}\hat{r})^2]$;
 б) $[\hat{L}_i, (\hat{p}\hat{r})\hat{p}]$, $[\hat{L}_i, (\hat{p}\hat{r})\hat{r}]$, $[\hat{L}_i, (a\hat{r} + b\hat{p})]$;
 в) $[\hat{L}_i, \hat{x}_k\hat{x}_l]$, $[\hat{L}_i, \hat{p}_k\hat{p}_l]$, $[\hat{L}_i, \hat{x}_k\hat{p}_l]$,

где \hat{r} , \hat{p} , \hat{L} — операторы радиуса-вектора, импульса и момента импульса частицы; a и b — постоянные величины.

3.5. Найти коммутатор $[\hat{L}_i, \hat{L}'_k]$, где \hat{L} и \hat{L}' — операторы момента импульса частицы по отношению к двум центрам, находящимся на расстоянии a друг от друга.

3.6. Используя коммутационные соотношения для оператора момента, найти $\text{Sp } L_i$, где L_i — матрица i -й компоненты момента L .

3.7. Представить оператор момента системы из двух частиц в виде двух слагаемых, описывающих момент частиц в с.ц.и. (момент относительного движения) и момент центра инерции системы.

3.8. Показать, что момент количества движения системы из двух частиц относительно их центра инерции перпендикулярен к оси, проходящей через обе частицы.

3.9. Найти нормированные соответствующим образом волновые функции Ψ_{r_0lm} , описывающие состояния частицы, находящейся на расстоянии r_0 от начала координат и имеющей момент l и его проекцию m на ось z .

3.10. Найти собственные функции операторов квадрата момента частицы и его проекции на ось z в импульсном представлении следующими двумя способами:

а) непосредственно из решения задачи на собственные функции и собственные значения операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z в импульсном представлении;

б) используя соотношение между волновыми функциями в g - и p -представлениях.

Вид собственных функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ в координатном представлении считается известным.

3.11. Показать, что функции, получающиеся в результате действия операторов $l_{\pm} = l_x \pm il_y$ на собственные функции Ψ_m

оператора проекции момента на ось z ($\hat{l}_z \Psi_m = m \Psi_m$), также являются собственными функциями оператора \hat{l}_z , отвечающими собственным значениям $m+1$ и $m-1$ в случаях \hat{l}_+ и \hat{l}_- соответственно.

3.12. Показать, что в состоянии Ψ_m с определенной проекцией момента m на ось z :

- а) $\overline{l_x} = \overline{l_y} = 0$;
- б) $\overline{l_x l_y} = -\overline{l_y l_x} = im/2$;
- в) $\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2}$.

3.13. В состоянии Ψ_{lm} с определенными значениями момента l и его проекции m на ось z найти средние значения $\overline{l_x^2}$, $\overline{l_y^2}$.

3.14. В состоянии Ψ_{lm} с определенными значениями момента l и его проекции m на ось z найти среднее значение и среднюю квадратичную флуктуацию проекции момента на ось \tilde{z} , составляющую угол α с осью z .

3.15. В состоянии частицы, характеризующемся угловой зависимостью волновой функции вида $\Psi = A \cos^n \varphi$ (φ — угол поворота относительно некоторой оси z , n — целое), найти вероятности различных значений m проекции момента на ось z .

3.16. В состоянии частицы, волновая функция которого имеет угловую зависимость вида $\Psi = A \exp(2i\varphi)$ (φ — азимутальный угол сферической системы координат), найти вероятности различных значений l момента частицы.

3.17. Доказать соотношение

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

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — шаровые функции.

3.18. В пространстве различных состояний момента величины L найти проекционные операторы $\mathcal{P}(M)$ на состояния с определенной проекцией момента M на ось z .

3.19. Найти закон преобразования волновой функции состояния частицы с определенным значением момента l в l_z -представлении при вращении системы координат на угол φ_0 (см. 3.1).

3.20. Показать, что из коммутационных соотношений $[\hat{L}_i, \hat{f}] = 0$ оператора физической величины \hat{f} с компонентами момента \hat{L}_i системы следует, что матричные элементы величины \hat{f} вида

$$\langle n, L, M' | \hat{f} | n, L, M \rangle$$

(где n означает набор квантовых чисел, которые вместе с L и M образуют полный набор) отличны от нуля лишь при $M = M'$ и при этом не зависят от M .

3.21. Найти закон преобразования волновой функции частицы в l_z -представлении при отражении координат, т. е. при преобразовании $\hat{l}\mathbf{r} = -\mathbf{r}$.

§ 2. Момент $L = 1$

3.22. В случае момента частицы $l = 1$ найти угловую зависимость волновой функции $\Psi_{\tilde{m}=0}(\theta, \varphi)$ (θ, φ — угловые переменные сферической системы координат с полярной осью z) состояния с определенной проекцией момента $\tilde{m} = 0$ на ось \tilde{z} , направление которой в пространстве определяется полярным α и азимутальным β углами.

3.23. Найти угловые зависимости волновых функций $\Psi_{l_x}(\theta, \varphi)$ и $\Psi_{l_y}(\theta, \varphi)$ состояний частицы с моментом $l = 1$ и определенным значением проекции момента на оси x и y соответственно. Воспользоваться известным видом шаровых функций $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$.

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

Задачу предлагается решить одним из следующих способов:

а) используя результат задачи 3.14;

б) путем нахождения коэффициентов разложения $c(m', m)$ заданной волновой функции в ряд по собственным функциям оператора $\hat{l}_{z'}$ (при решении задачи этим способом ограничиться каким-либо частным значением m , например $m = 0$).

Рассмотреть, в частности, случай, когда ось z' перпендикулярна оси z .

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

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

3.26. Указать в l_z -представлении явный вид операторов компонент момента, повышающего \hat{l}_+ и понижающего \hat{l}_- операторов ($\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$) для момента $l = 1$.

Каков вид операторов \hat{l}_{\pm}^3 ?

3.27. Найти из решения уравнения на собственные функции волновую функцию состояния частицы с $l = 1$ и проекцией момента $l_x = 0$ в l_z -представлении.

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

3.29. Найти явный вид оператора $F = F(\mathbf{a}l)$, где \mathbf{a} — обычный вектор, $F(x)$ — некоторая функция переменной x , \hat{I} — оператор момента частицы. Оператор F действует в пространстве состояний частицы с моментом $l = 1$ (или же \hat{I} являются матрицами момента $l = 1$).

3.30. Найти явный вид оператора $R(\varphi_0)$ поворота системы координат на угол φ_0 (см. 3.1 и 3.19), действующего в пространстве состояний частицы с моментом $l = 1$.

3.31. Используя результат предыдущей задачи, найти угловую зависимость волновой функции $\Psi_{\tilde{m}=0}(\theta, \varphi)$ состояния частицы с моментом $l = 1$ и его проекцией $\tilde{m} = 0$ на ось \tilde{z} , направление которой определяется углами α, β . Сравнить с 3.22.

3.32. В пространстве состояний частицы с моментом $l = 1$ найти проекционные операторы $P(m)$ ($m = 0, \pm 1$) на состояния с определенной проекцией момента m на ось z .

3.33. Обобщить результат предыдущей задачи на случай произвольно направленной оси \tilde{z} .

Используя полученный вид операторов $P(\tilde{m})$, найти (в l_z -представлении) волновую функцию состояния частицы с проекцией момента $\tilde{m} = 0$ на ось \tilde{z} .

Найти также указанным способом волновую функцию $\Psi_{\tilde{m}=0}(\theta, \varphi)$ состояния частицы с моментом $l = 1$. Сравнить с результатами 3.22 и 3.31.

§ 3. Сложение моментов

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

3.35. Каков спектр физической величины, представляющей собой квадрат векторного произведения двух моментов l_1 и l_2 ?

3.36. Найти следующие коммутаторы:

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

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

в) $[\hat{L}_1, \hat{x}_{1k} \hat{x}_{2l}], [\hat{L}_1, \hat{x}_{1k} \hat{p}_{2l}],$

где \hat{I}_1, \hat{I}_2 — операторы моментов двух частиц, $\hat{L} = \hat{I}_1 + \hat{I}_2$ — оператор суммарного момента.

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

Указать возможные значения полного момента L совокупной системы $(1 + 2)$ и вычислить средние значения \hat{L} и \hat{L}^2 в рассматриваемом состоянии.

Усреднить полученное выражение для \hat{L}^2 по всем состояниям с различными значениями m_1 и m_2 , считая их равновероятными, и результат сравнить с соответствующим средним значением, вытекающим из классического рассмотрения.

3.38. В условиях предыдущей задачи вычислить вероятности различных значений суммарного момента L для частного случая $m_1 = l_1$, $m_2 = l_2 - 1$.

3.39. Моменты двух слабо взаимодействующих систем, одинаковые по величине ($l_1 = l_2 = l$), складываются в результирующий момент L . Показать, что волновая функция $\Psi_L(m_1, m_2)$ состояния системы с определенным значением величины L в $l_1 z l_2 z$ -представлении имеет определенную симметрию по отношению к перестановке местами переменных m_1 и m_2 (*). Как зависит характер симметрии волновой функции от значения величины L ?

3.40. Используя результат предыдущей задачи, найти вероятности различных значений суммарного момента L в состоянии двух систем с одинаковыми моментами l и определенными проекциями складываемых моментов на ось z , равными $m_1 = l$ и $m_2 = l - 1$. Сравнить с результатом задачи 3.38.

3.41. Две системы, имеющие одинаковые моменты l , находятся в состоянии с определенным значением L суммарного момента, равным: а) $L = 2l$; б) $L = 2l - 1$ — и проекцией суммарного момента на ось z , равной $M = 2l - 1$ (в обоих случаях).

Найти вероятности различных значений проекций складываемых моментов на ось z в рассматриваемом состоянии.

3.42. Используя результаты задач 3.37 и 3.39, найти вероятности различных значений суммарного момента в состоянии двух систем с моментами, равными единице, и проекциями этих моментов на ось z , равными нулю.

Обобщить результат задачи на случай произвольных (но одинаковых) значений моментов l каждой из систем и одинаковых проекций складываемых моментов на ось z , равных $m_1 = m_2 = l - 1$.

3.43. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае $l_1 = l_2 = 1$ и $m_1 = 1$, $m_2 = -1$.

Обобщить результат на случай произвольных значений моментов $l_1 = l_2 = l$ каждой из систем и проекций моментов на ось z , равных $m_1 = l$, $m_2 = l - 2$.

*) Во избежание недоразумений подчеркнем, что следует различать двойной смысл употребления буквы m , а именно: m как с.з. оператора l_z и m как переменная l_z -представления (впрочем, это замечание относится и к произвольной физической величине f).

В связи с этим напомним, что мы стремимся придерживаться такой записи с.ф. $\Psi_l(q)$, в которой q является переменной используемого представления, а f указывает соответствующее с.з.

3.44. Используя результат из 3.39, показать, что в состоянии двух слабо взаимодействующих систем с одинаковыми моментами l , отвечающем определенному значению L суммарного момента и его проекции M на ось z , вероятности значений проекций на ось z складываемых моментов $m_{1(2)} = m$ и $m_{1(2)} = M - m$ равны.

3.45. Основываясь на результатах 3.37 и 3.39, найти ограничения сверху и снизу на вероятности возможных значений L суммарного момента двух слабо взаимодействующих систем, имеющих одинаковые моменты $l_1 = l_2 = 2$ и их проекции на ось z , равные $m_1 = m_2 = 0$.

3.46. Моменты двух систем, одинаковые по величине ($l_1 = l_2 = l$), складываются в результирующий момент L , равный нулю: $L = 0$.

Найти волновую функцию этого состояния в $l_{1z}l_{2z}$ -представлении и вероятности различных значений проекций складываемых моментов на произвольную ось.

При решении задачи воспользоваться операторами L_{\pm} .

3.47. Моменты двух частиц равны $l_1 = l_2 = 1$. Построить волновые функции Ψ_{LM} состояний с определенным значением L суммарного момента и его проекции M на ось z .

Специально обсудить угловую зависимость состояния с $L = 0$.

Найти в рассматриваемых состояниях Ψ_{LM} вероятности различных значений проекций складываемых моментов на ось z .

Задачу предлагается решить на основе результатов задач 3.39 и 3.46.

3.48. Произвести классификацию возможных состояний системы, состоящей из трех слабо взаимодействующих подсистем с моментами $l_1 = l_2 = 1$ и $l_3 = l$, по значениям суммарного момента L системы.

3.49. В пространстве различных состояний моментов l_1 и l_2 двух слабо взаимодействующих систем найти проекционные операторы $P(L)$ на состояния с заданным значением L суммарного момента.

3.50. В пространстве различных состояний моментов l_1 и l_2 двух слабо взаимодействующих систем найти проекционные операторы $P(L, M)$ на состояния с заданным значением L суммарного момента и его проекции M на ось z .

3.51. Моменты двух слабо взаимодействующих систем равны $l_1 = l_2 = 1$. Используя технику проекционных операторов, найти (в $l_{1z}l_{2z}$ -представлении) волновую функцию $\Psi_{L=0}$ состояния с значением $L = 0$ суммарного момента. Сравнить с результатом 3.47.

3.52. Исходя из коммутационных соотношений $[L_i, f_k] = i\epsilon_{ikl}f_l$ для операторов компонент момента L_i и произвольной векторной величины f_k , характеризующих некоторую систему, показать, что:

а) недиагональные матричные элементы оператора \hat{f}_z равны нулю:

$$\langle n, L, M | \hat{f}_z | n, L, M' \rangle = 0, \quad M \neq M',$$

где n — совокупность квантовых чисел, которая вместе с L и M образует полный набор;

б) диагональные матричные элементы \hat{f}_z имеют зависимость от M вида

$$\langle n, L, M | \hat{f}_z | n, L, M \rangle = a(n, L) M,$$

где $a(n, L)$ — некоторое число, зависящее только от квантовых чисел n и L (но не от M).

Таким образом из а) и б) вытекает «условное» равенство

$$\hat{f}_z \doteq a(n, L) \hat{L}_z,$$

которое следует понимать в том смысле, что матричные элементы обеих частей равенства между произвольными состояниями, отвечающими одним и тем же значениям n и L (и произвольным M, M'), равны.

в) Обобщить результаты а) и б) на случай x -, y -компонент операторов и установить «условное» равенство (в указанном выше смысле)

$$\hat{\mathbf{f}} \doteq a(n, L) \hat{\mathbf{L}}.$$

г) Показать, что величина $a(n, L)$ равна

$$a(n, L) = \frac{\langle n, L, M | \hat{\mathbf{f}} \hat{\mathbf{L}} | n, L, M \rangle}{L(L+1)}.$$

Так как оператор $(\hat{\mathbf{f}} \hat{\mathbf{L}})$ — оператор скалярной величины, коммутирующий с \mathbf{L} , то диагональные матричные элементы этого оператора не зависят от M (см. 3.20).

3.53. Используя результат предыдущей задачи, найти матричные элементы оператора физической величины $\hat{\mathbf{f}} = [\hat{I}_1 \hat{I}_2]$ между состояниями, отвечающими определенному значению L суммарного момента ($\hat{\mathbf{L}} = \hat{I}_1 + \hat{I}_2$).

3.54. Найти средние значения компонент векторной физической величины $\hat{\boldsymbol{\mu}} = g_1 \hat{I}_1 + g_2 \hat{I}_2$ в состояниях с заданным значением L суммарного момента ($\hat{\mathbf{L}} = \hat{I}_1 + \hat{I}_2$) и его проекции M на ось z .

Определить \bar{I}_1 и \bar{I}_2 в таких состояниях.

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

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

где $C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM}$ — коэффициенты Клебша — Гордана (для которых существует замкнутое выражение); $\Psi_{lm}^{(1, 2)}$ — нормированные волновые функции, описывающие системы, моменты которых складываются в результирующий L ; Ψ_{LM} — нормированная волновая функция совокупной системы.

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

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

§ 4. Тензорный формализм в теории момента

3.57. Показать, что функция вида

$$\Psi_l(\mathbf{r}) = \varepsilon_{i_1 k_1 \dots i_l k_l} x_{i_1} x_{k_1} \dots x_{i_l} x_{k_l} f(r),$$

где $f(r)$ — произвольная функция, $\varepsilon_{i_1 k_1 \dots i_l k_l}$ — симметричный по любой паре индексов тензор ранга l с равным нулю следом, $\varepsilon_{i i p \dots p} = 0$, является собственной функцией оператора квадрата момента частицы, отвечающей значению момента, равному l .

3.58. Показать, что число независимых компонент у симметричного тензора ранга l с равным нулю следом (см. предыдущую задачу) равно $2l + 1$, как и число шаровых функций Y_{lm} . Тем самым будет доказано, что угловая зависимость волновой функции, рассмотренная в предыдущей задаче, является наиболее общей для состояний частицы с моментом l .

3.59. Согласно задаче 3.57 наиболее общая зависимость от угловых переменных θ, φ волновой функции состояния частицы с моментом $l = 1$ имеет вид $\Psi_{l=1} = (\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{n})$, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Какому условию удовлетворяет вектор $\boldsymbol{\varepsilon}$ в случае нормировки волновой функции на единицу:

$$\int |\Psi_{l=1}|^2 d\Omega = 1?$$

3.60. В частных случаях значений момента частицы $l = 1$ и $l = 2$ найти компоненты соответствующего тензора $(\varepsilon_i(m), \varepsilon_{ik}(m))$, при которых функция Ψ_l , введенная в 3.57, описывает состояние частицы с определенным значением момента и его проекции m на ось z , т. е. является шаровой функцией Y_{lm} .

3.61. Используя значения компонент векторов $\boldsymbol{\varepsilon}(m)$, полученные в предыдущей задаче, найти компоненты тензора вида

$$\sum_{m=-l}^l \varepsilon_i^*(m) \varepsilon_k(m).$$

3.62. В соответствии с результатом задачи 3.57 наиболее общая зависимость от угловых переменных волновой функции состояния частицы с моментом $l = 1$ имеет вид $\Psi_{l=1} = (\epsilon \mathbf{n})$, где ϵ — произвольный комплексный вектор. Каким условиям должен удовлетворять этот вектор, чтобы можно было указать такую ось в пространстве, проекция момента на которую имеет определенное значение, равное

а) $\tilde{m} = 0$; б) $\tilde{m} = \pm 1$?

3.63. Показать, что для произвольного состояния частицы с моментом $l = 1$ можно указать такую ось \tilde{z} в пространстве, вероятность проекции момента $\tilde{m} = 0$ на которую равна нулю.

3.64. Угловая зависимость волновой функции состояния частицы с моментом $l = 1$ имеет вид $\Psi_{l=1} = (\epsilon \mathbf{n})$, где ϵ — произвольный комплексный вектор. Найти вероятности различных значений проекции момента на ось \tilde{z} , направление которой определяется единичным вектором \mathbf{n}_0 .

3.65. Найти средние значения компонент тензора $n_i n_k$ в произвольном состоянии частицы с моментом $l = 1$. Угловая зависимость волновой функции такого состояния, согласно 3.57, имеет вид $\Psi_{l=1} = (\epsilon \mathbf{n})$.

3.66. Найти средние значения компонент вектора момента \mathbf{l} в произвольном состоянии частицы с моментом $l = 1$ (вид волновой функции такого состояния приведен в предыдущей задаче).

3.67. Согласно 3.57 угловая зависимость волновой функции произвольного состояния частицы с моментом $l = 1$ имеет вид $\Psi_{l=1} = (\mathbf{a} \mathbf{n})$, т. е. полностью определяется комплексным вектором \mathbf{a} . Поэтому при рассмотрении состояний с моментом $l = 1$ можно перейти к представлению (назовем его векторным), в котором волновой функцией является совокупность компонент вектора \mathbf{a}_k , т. е. $\Psi_k \equiv a_k$ ($k = 1, 2, 3$).

Найти явный вид операторов компонент момента в векторном представлении.

Установить соответствие между векторным и l_z -представлением.

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

а) наиболее общий вид угловой зависимости волновой функции;

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

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

При решении использовать результаты задач 3.57 и 3.60.

Глава 4

ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ

§ 1. Системы с аксиальной симметрией

4.1. Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии плоского ротатора *) с моментом инерции I .

Какова кратность вырождения уровней?

4.2. Состояние плоского ротатора описывается волновой функцией вида $\Psi = C \cos^n \varphi$ (n — целое). Найти функции распределения ротатора по энергиям и проекциям момента, а также средние значения этих величин в указанном состоянии.

4.3. Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии пространственного ротатора с моментом инерции I .

Какова кратность вырождения уровней?

4.4. Состояние пространственного ротатора описывается волновой функцией вида:

$$a) \Psi = C \cos^2 \theta; \quad б) \Psi = C e^{2i\varphi}.$$

В указанных состояниях найти функции распределения ротатора по энергии, квадрату момента и его проекции на ось z , а также средние значения этих величин.

4.5. Найти энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний плоского гармонического осциллятора.

Определить кратность вырождения энергетических уровней.

4.6. В стационарном состоянии Ψ_{11} плоского осциллятора (см. решение 4.5) найти вероятности различных значений проекции момента на ось, перпендикулярную плоскости колебаний.

4.7. Частица находится в аксиально симметричном поле $U(\rho)$.

Какую кратность вырождения имеют в общем случае (т. е. в отсутствие случайного вырождения) энергетические уровни дискретного спектра «поперечного» движения частицы (т. е. движения в плоскости, перпендикулярной оси симметрии поля)?

Может ли кратность вырождения первого возбужденного уровня «поперечного» движения быть равной 3; 4?

4.8. Найти энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой двумерной потенциальной яме

$$U(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \leq a, \\ \infty, & \rho > a. \end{cases}$$

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

4.9. Найти энергетические уровни дискретного спектра частицы в двумерной потенциальной яме $U(\rho)$ вида

$$U(\rho) = \begin{cases} -U_0, & \rho < a, \\ 0, & \rho \geq a, \end{cases}$$

отвечающие значению $m = 0$ проекции момента частицы на направление, перпендикулярное плоскости движения.

Специально обсудить случай мелкой ямы $\mu a^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$; сравнить с одномерным движением.

4.10. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае $m \neq 0$.

Получить условие существования состояний дискретного спектра частицы с отличным от нуля значением проекции момента m .

4.11. Для частицы, находящейся в двумерном поле $U(\rho) = -\alpha \delta(\rho - a)$, найти энергетические уровни дискретного спектра с проекцией момента, равной нулю: $m = 0$.

Специально обсудить предельные случаи мелкой $\mu \alpha a / \hbar^2 \ll 1$ и глубокой $\mu \alpha a / \hbar^2 \gg 1$ ям. Сравнить с одномерным движением.

4.12. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае $m \neq 0$.

Получить условие существования состояний дискретного спектра частицы с отличным от нуля значением проекции момента m .

4.13. Найти энергетические уровни частицы дискретного спектра в двумерном поле $U(\rho) = -\alpha/\rho$. Определить кратность вырождения уровней. Сравнить со случаем кулоновского поля $U(r) = -\alpha/r$.

4.14. Для частицы, находящейся в бесконечно глубокой двумерной потенциальной яме вида, указанного в 4.8, найти приближенно энергию основного состояния вариационным методом, аппроксимируя волновую функцию выражениями вида ($\rho < a$):
а) $\Psi_0(\rho) = A(a - \rho)$; б) $\Psi_0(\rho) = B \cos(\pi \rho / 2a)$.

Сравнить полученные результаты с точным значением.

4.15. То же, что и в предыдущей задаче, но для энергии $E_{n\rho=0, |m|=1}$ первого возбужденного состояния частицы с проекцией момента $|m| = 1$. Радиальную волновую функцию аппроксимировать полиномом второй степени, удовлетворяющим необходимым граничным условиям в точках $\rho = 0$ и $\rho = a$.

4.16. Получить приближенное значение энергии основного состояния плоского осциллятора вариационным методом, используя пробную функцию вида

$$\Psi_0(\rho) = C \exp(-\alpha \rho), \quad \text{где } \alpha \text{ — вариационный параметр.}$$

Сравнить с точным значением (см. 4.5).

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

4.18. В двумерном случае найти функции Грина $G_E^{(\pm)}(\rho, \rho')$ уравнения Шредингера для свободной частицы при энергии $E > 0$. Индексы (\pm) у функции Грина указывают на характер ее асимптотики при $\rho \rightarrow \infty$:

$$G_E^{(\pm)} \propto \exp[\pm i \sqrt{2\mu E/\hbar^2} \rho].$$

4.19. Найти функцию Грина $G_E(\varphi, \varphi')$ плоского ротатора (см. 4.1).

Рассматривая функцию Грина G_E как аналитическую функцию комплексной переменной E , показать, что она имеет особые точки — полюсы, — и установить соответствие между положениями этих полюсов в плоскости E и энергетическими уровнями ротатора.

§ 2. Состояния дискретного спектра в центральных полях

4.20. Как изменяются значения $E_{n,l}$ энергетических уровней частицы в дискретном спектре:

- а) при фиксированном значении l с увеличением n_r ;
- б) при фиксированном значении n_r с увеличением l ?

4.21. Для частицы, находящейся в центральном поле,

- а) могут ли быть двукратно вырожденные уровни?
- б) какую кратность вырождения может иметь первый возбужденный уровень?
- в) что можно сказать о квантовых числах уровня, если его кратность вырождения равна 7; 9?

4.22. Обозначим через E_N значение энергии N -го уровня дискретного спектра частицы в центральном поле (нумерация уровней ведется в порядке возрастания энергии; основному состоянию соответствует $N = 1$). Указать ограничения на максимально возможные значения:

- а) момента частицы в состояниях, имеющих такую энергию E_N ;
- б) кратности вырождения такого уровня.

4.23. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции стационарных состояний сферического осциллятора $U(r) = kr^2/2$, используя метод разделения переменных в уравнении Шредингера в декартовых координатах. Определить кратность вырождения уровней.

4.24. Произвести классификацию четырех нижних уровней осциллятора по значениям квантовых чисел n_r , l и четности, исходя только из известного значения (см. предыдущую задачу) кратности вырождения уровней.

Какая комбинация волновых функций Ψ_{n_1, n_2, n_3} отвечает состоянию осциллятора с моментом $l = 0$ (при $N = n_1 + n_2 + n_3 + 1 = 2$)?

4.25. Найти уровни энергии и собственные функции $\Psi_{n_r, l, m}(r, \theta, \varphi)$ оператора Гамильтона сферического осциллятора из решения уравнения Шредингера в сферических координатах. Произвести классификацию состояний осциллятора, относящихся к N -му энергетическому уровню, по квантовым числам n_r , l и четности. Какова кратность вырождения уровней?

4.26. Показать, что для пространственного осциллятора операторы

$$\hat{T}_{ik} = \hat{p}_i \hat{p}_k / \mu + k \hat{x}_i \hat{x}_k$$

коммутируют с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2 / 2\mu + kr^2 / 2$.

Убедившись в том, что коммутатор операторов $\hat{\mathbf{I}}^2$ и \hat{T}_{11} отличен от нуля, объяснить «случайное» вырождение энергетических уровней осциллятора.

4.27. В классической механике при движении частицы в кулоновском поле $U(r) = -\alpha/r$ вектор $\mathbf{A} = [\mathbf{pM}] / \mu - \alpha \mathbf{r} / r$ является интегралом движения. Указать вид эрмитова оператора $\hat{\mathbf{A}}$, который можно сопоставить классической векторной величине \mathbf{A} .

Найти коммутаторы $[\hat{H}, \hat{A}_i]$ и $[\hat{\mathbf{I}}^2, \hat{A}_i]$ и на основании полученных результатов объяснить «случайное» вырождение энергетических уровней частицы в кулоновском поле.

4.28. В основном состоянии водородоподобного атома (иона) найти для электрона r^n .

4.29. Найти эффективный (средний) потенциал $\phi(r)$, действующий на заряженную частицу, пролетающую сквозь невозбужденный атом водорода (пренебрегая поляризацией последнего). Получить предельные значения $\phi(r)$ для больших и малых расстояний частицы от атома.

4.30. Найти среднее электрическое поле атома водорода в $2p$ -состоянии с определенным значением $m = 0$ проекции момента электрона на ось z на больших расстояниях от атома.

4.31. Найти среднее электрическое поле и его флуктуацию (флуктуацию компонент поля) на больших расстояниях от атома водорода, находящегося в основном состоянии.

Обратить внимание на характер убывания найденных величин с увеличением расстояния.

4.32. Стационарное состояние электрона в атоме водорода характеризуется «параболическими» квантовыми числами $n_1 = 1$, $n_2 = 0$ и магнитным квантовым числом $m = 0$.

Найти распределение вероятностей координаты электрона z и его момента l в этом состоянии (z — ось параболического квантования). Определить средний дипольный момент атома в указанном состоянии.

4.33. Найти уровни энергии $E_{n_r, l}$ и волновые функции $\Psi_{n_r, l, m}$ стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой сфе-

рической яме

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ \infty, & r > a. \end{cases}$$

4.34. Найти энергетические уровни частицы в поле

$$U(r) = -\alpha\delta(r-a).$$

Каково условие существования состояний дискретного спектра с моментом l ?

4.35. Найти уровни энергии дискретного спектра s -состояний частицы в поле

$$U(r) = -U_0 \exp(-r/a).$$

Получить условие существования таких состояний.

Каково условие появления новых s -состояний дискретного спектра частицы при углублении ямы? Специально обсудить случай глубокой ямы $\mu a^2 U_0 / \hbar^2 \gg 1$.

4.36. Найти соответствие между энергетическими уровнями $E_{n,l}$ и нормированными волновыми функциями $\Psi_{n,l}(r)$ стационарных s -состояний ($l=0$) дискретного спектра частицы в центральном поле $U(r)$ и уровнями E_n и нормированными функциями $\Psi_n(x)$ в одномерном поле $\tilde{U}(x)$ вида

$$\tilde{U}(x) = \begin{cases} U(x), & x \geq 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Используя установленное соответствие, найти условие существования состояний дискретного спектра в поле

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < a, \\ 0, & r \geq a. \end{cases}$$

4.37. Обобщить результат задачи 2.18 на случай s -состояний частицы в центральном поле $U(r)$.

Найти условие существования дискретного спектра в поле

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r < a, \\ -\alpha/r^n, & r \geq a \quad (n > 2). \end{cases}$$

4.38. Обозначим через E_n и \tilde{E}_n значения n -го уровня энергии дискретного спектра в полях $U(r)$ и $\tilde{U}(r)$, связанных условием

$$\tilde{U}(r) = U(r) + \delta U(r), \quad \delta U(r) \geq 0.$$

Показать, что $\tilde{E}_n \geq E_n$.

4.39. Показать, что если параметры центрального поля

$$U(r) = -U_0/\text{sh}^2(r/a)$$

таковы, что в поле нет «падения» частиц на центр поля, то состояния дискретного спектра в таком поле отсутствуют.

4.40. Найти среднее давление, оказываемое частицей, находящейся в стационарном состоянии в бесконечно глубокой сферической яме (см. 4.33), на «стенку» ямы.

4.41. Получить приближенное значение энергии основного состояния частицы в кулоновском поле $U = -\alpha/r$ вариационным методом, используя пробные функции вида:

$$a) \Psi = C \exp(-\alpha^2 r^2); \quad б) \Psi = \begin{cases} C(a-r), & r < a, \\ 0, & r > a, \end{cases}$$

где α, a — вариационные параметры. Сравнить с точным значением.

4.42. То же, что и в предыдущей задаче, для осциллятора $U = kr^2/2$ и пробных функций вида:

$$a) \Psi(r) = C \exp(-\alpha r); \quad б) \Psi(r) = \begin{cases} C(a-r), & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

4.43. Получить приближенное значение энергии $2p$ -состояния частицы в кулоновском поле вариационным методом, используя пробную функцию вида

$$\Psi(\mathbf{r}) = (\mathbf{a}\mathbf{r}) \exp(-\kappa^2 r^2),$$

где \mathbf{a} — постоянный вектор (см. 3.59 и 3.60), κ — вариационный параметр. Сравнить с точным значением.

4.44. То же, что и в предыдущей задаче, но для первого возбужденного состояния осциллятора с моментом $l = 1$ и пробной функции

$$\Psi(\mathbf{r}) = (\mathbf{a}\mathbf{r}) \exp(-\alpha r).$$

4.45. Найти функцию Грина $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ уравнения Шредингера для свободной частицы при энергии $E < 0$, убывающую при $r \rightarrow \infty$. С помощью функции Грина записать уравнение Шредингера для состояний частицы в дискретном спектре в поле $U(r)$, убывающем при $r \rightarrow \infty$, в виде интегрального уравнения.

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

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

Установленное необходимое условие сравнить с точным условием существования состояний дискретного спектра в полях:

а) прямоугольная яма (см. 4.36); б) экспоненциальная яма, рассмотренная в 4.35.

4.47. Показать, что выполнение неравенства

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

является необходимым условием существования в центральном поле притяжения $U(r) \leq 0$, $U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, хотя бы одного уровня дискретного спектра частицы с моментом l .

4.48. Исходя из вариационного принципа и используя пробную функцию вида $\Psi = C \exp(-\kappa r)$ ($\kappa > 0$ — вариационный параметр), получить достаточное условие существования в центральном поле $U(r) \leq 0$, $U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, хотя бы одного уровня энергии дискретного спектра частицы.

Применить полученное условие к полям:

а) δ -функциональная яма (см. 4.34); б) экспоненциальная яма (см. 4.35) — и сравнить с точным условием.

4.49. Для указанных ниже полей сравнить следующие три значения параметра $\xi = \mu a^2 U_0 / \hbar^2$ (характеризующего глубину соответствующей потенциальной ямы): ξ_n — значение параметра ξ , которое является необходимым для существования в поле состояний дискретного спектра согласно результату задачи 4.46; ξ_0 — значение, соответствующее точному, и ξ_d — достаточному условию (согласно предыдущей задаче) существования состояний дискретного спектра.

а) δ -функциональная яма (см. 4.34): $U(r) = -U_0 a \delta(r - a)$;

б) экспоненциальная яма (см. 4.35);

в) потенциал Юкавы $U(r) = -U_0 a \exp(-r/a) / r$ (значение $\xi_0 = 0,84$ — результат численного расчета на ЭВМ).

4.50. То же, что и в 4.48, для частицы в поле

$$U(r) = -U_0 \exp(-r^2/a^2)$$

и пробной функции вида

$$\Psi = C \exp(-\kappa^2 r^2).$$

Найти также и необходимое условие существования состояний дискретного спектра согласно 4.46.

4.51. То же, что и в 4.48, но для состояния дискретного спектра с моментом $l = 1$. Пробную функцию выбрать в виде

$$\Psi = (ar) \exp(-\kappa r).$$

Применить полученное условие к потенциалу Юкавы $U = -\alpha e^{-r/a} / r$ и сравнить с необходимым условием, рассчитанным согласно 4.47.

4.52. Найти распределение по импульсам частицы в основном состоянии в кулоновском поле $U = -\alpha / r$.

4.53. Для основного состояния частицы в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме (см. 4.33) найти функцию распределения по импульсам частицы.

4.54. Решить задачу о состояниях дискретного спектра с моментом $l=0$ в поле $U(r)=-\alpha\delta(r-a)$, исходя из решения уравнения Шредингера в импульсном представлении.

4.55. Найти решение уравнения Шредингера предыдущей задачи при граничном условии $\Phi(p)=0$ при $p \leq p_0$ ($p_0 > 0$).

Показать, что в такой постановке задачи в яме произвольной глубины имеется состояние дискретного спектра, в котором частица локализована в ограниченной области пространства, и найти энергию связи частицы в случае мелкой ямы $\mu\alpha a/\hbar^2 \ll 1$ (сравнить с результатом предыдущей задачи).

Образование связанного состояния частицы в рассмотренной постановке задачи при наличии сколь угодно слабого притяжения составляет содержание так называемого феномена Купера — явления, лежащего в основе микроскопического механизма сверхпроводимости.

4.56. Найти квазидискретные уровни энергии (их положение и ширину) s -состояний частицы в поле $U(r)=\alpha\delta(r-a)$.

Специально обсудить случай малопроницаемого барьера $\mu\alpha a/\hbar^2 \gg 1$ и не очень сильно возбужденных квазидискретных уровней.

Г л а в а 5

СПИН

§ 1. Формализм спина $s=1/2$

5.1. Для частицы со спином $s=1/2$ найти из решения задачи на собственные функции и собственные значения спиновые функции Ψ_{s_i} ($i=1, 2, 3$), описывающие состояния частицы с определенной проекцией спина на оси x, y, z системы координат.

5.2. Указать вид оператора проекции спина \hat{s}_n на произвольное направление, определяемое единичным вектором \mathbf{n} .

Чему равно среднее значение проекции спина на ось \mathbf{n} в состоянии с определенной проекцией спина $s_z = \pm 1/2$ на ось z ?

Каковы вероятности проекции спина $\pm 1/2$ на направление \mathbf{n} в указанных состояниях?

5.3. Найти собственные значения оператора $\hat{f} = a + \mathbf{b}\hat{\sigma}$ (a — число, \mathbf{b} — обычный вектор, $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули).

5.4. Могут ли квадраты проекций электронного спина на оси x, y, z иметь одновременно определенные значения?

5.5. Произвольный линейный оператор \hat{L} , действующий в пространстве спиновых переменных частицы с $s=1/2$, является квадратной матрицей 2-го ранга. Какие ограничения накладывает эрмитовость оператора \hat{L} на элементы этой матрицы?

Найти собственные значения такого эрмитова оператора.

5.6. Убедиться в полноте системы из четырех двухрядных матриц $\hat{I}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$.

Показать, что коэффициенты в разложении произвольной квадратной матрицы 2-го ранга \hat{A} по этим матрицам

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

могут быть вычислены по формулам

$$a_0 = \frac{1}{2} \text{Sp } \hat{A}, \quad \mathbf{a} = \frac{1}{2} \text{Sp } (\hat{\sigma} \hat{A}).$$

5.7. Каков явный вид операторов $|\hat{\sigma}_z|, |\hat{\sigma}|, \hat{\sigma}[\hat{\sigma}\hat{\sigma}]?$

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

5.9. Найти явное выражение оператора вида $\hat{F} = F(\mathbf{a} + \mathbf{b}\hat{\sigma})$, где $F(x)$ — произвольная функция переменной x , $\mathbf{a} = \text{const}$, \mathbf{b} — обычный вектор.

Рассмотреть, в частности, оператор $\hat{F} = \exp(i\mathbf{a}\hat{\sigma})$.

5.10. Указать возможный вид операторов проекций электронного спина $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ в s_x -представлении.

Найти вид унитарного оператора \hat{O} , осуществляющего переход от s_z - к s_x -представлению.

5.11. Для спина $s = 1/2$ указать вид повышающего и понижающего операторов \hat{s}_{\pm} и рассмотреть их действие на собственные функции Ψ_{s_z} . Каковы операторы \hat{s}_{\pm}^2 ?

5.12. Показать, что для состояния, описываемого спиновой волновой функцией

$$\Psi = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha e^{i\beta} \end{pmatrix}$$

(это есть наиболее общий вид нормированной волновой функции спинового состояния частицы со спином $s = 1/2$; $0 \leq \alpha \leq \pi/2$, $0 \leq \beta < 2\pi$), можно указать такую ось в пространстве, проекция спина на которую имеет определенное значение $+1/2$. Найти полярный и азимутальный углы этой оси (ср. с результатом 3.62 для момента $L = 1$).

Используя полученный результат, решить задачу 5.1.

5.13. Найти проекционные операторы $\hat{P}_{s_z = \pm 1/2}$ на состояния с определенным значением проекции спина $s_z = \pm 1/2$ на ось z .

5.14. Найти проекционные операторы $\hat{P}_{s_n = \pm 1/2}$ на состояния с определенным значением проекции спина $\pm 1/2$ на ось, направление которой определяется единичным вектором \mathbf{n} .

С помощью этих операторов найти спиновые функции $\Psi_{s_n = \pm 1/2}$. Сравнить с результатом задачи 5.12.

5.15. Для частицы со спином $s = 1/2$ указать закон преобразования спиновой волновой функции $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ при враще-

нии системы координат на угол φ_0 относительно оси, направление которой определяется единичным вектором \mathbf{p}_0 .

Показать, что величина $\Phi^* \Psi \equiv \varphi_1^* \psi_1 + \varphi_2^* \psi_2$ не изменяется при указанном преобразовании, т. е. является скаляром.

5.16. Показать, что при вращении системы координат величины $\mathbf{V} = \Phi^* \hat{\sigma} \Psi$ ($V_i = \sum_{\alpha, \beta} \varphi_\alpha^* (\hat{\sigma}_i)_{\alpha\beta} \psi_\beta$) преобразуются как компоненты вектора.

5.17. Для двух частиц со спичном $s = 1/2$ найти собственные функции Ψ_{SS_z} операторов суммарного спина (точнее, его квадрата) и его проекции на ось z .

Вид функций Ψ_{10} и Ψ_{00} найти одним из следующих способов (учитывая наиболее общий вид функции, отвечающей $S_z = 0$:

$$\Psi_{S_z=0} = C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2;$$

а) непосредственно из уравнения на собственные функции оператора \hat{S}^2 ;

б) воспользовавшись операторами S_\pm ;

в) основываясь на свойствах симметрии функций Ψ_S по отношению к перестановке спиновых переменных обеих частиц, аналогичных установленным в 3.39.

5.18. Показать, что оператор $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$ в состояниях системы из двух частиц, отвечающих определенному значению суммарного спина, также имеет определенное значение.

5.19. Две частицы со спином $s = 1/2$ находятся в состоянии, описываемом спиновой функцией вида $\Psi_{\alpha\beta} = \varphi_\alpha \chi_\beta$ ($\alpha, \beta = 1, 2$ — спиновые переменные каждой из частиц; спиновые функции обеих частиц нормированы на единицу, так, например, $\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$, $|\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2 = 1$), т. е. между спиновыми состояниями частиц нет корреляции.

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

5.20. Представить выражение $(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)^2$ в виде, содержащем матрицы Паули $\hat{\sigma}_{1,2}$ в степени не выше первой. Индексы 1, 2 у матриц означают, что эти матрицы являются операторами, действующими в пространстве спиновых переменных 1-й и 2-й частиц.

5.21. Найти явный вид оператора $F = F(a + b\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)$, где $F(x)$ — произвольная функция переменной x , a и b — некоторые числа.

5.22. Используя результат задачи 5.18, найти проекционные операторы $P_{S=0,1}$ на состояния двух частиц со спином $s = 1/2$, отвечающие определенному значению суммарного спина частиц.

5.23. Для системы из двух частиц со спином $s = 1/2$ найти оператор спинового обмена \hat{C} , действие которого на спиновую функцию $\Psi_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2$ — спиновые переменные 1-й и 2-й частиц) состоит в следующем: $\hat{C}\Psi_{\alpha\beta} = \Psi_{\beta\alpha}$, т. е. этот оператор переставляет спиновые переменные обеих частиц (задача состоит в явном выражении оператора \hat{C} через матрицы Паули).

5.24. Для системы из двух частиц со спином $s = 1/2$ найти проекционные операторы $\hat{P}_{S S_z}$ на состояния с определенным значением суммарного спина S и его проекции S_z на ось z .

5.25. Найти собственные функции и собственные значения следующих операторов:

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

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

Параметры a, b — вещественны, так что операторы $\hat{V}_{1,2}$ — эрмитовы.

5.26. Спины N частиц, равные s каждый, складываются в результирующий спин $S = Ns$. Каков суммарный спин любых 2; 3; ...; n частиц в указанном состоянии?

5.27. Спиновая функция системы из N частиц со спином $s = 1/2$ имеет вид

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

Найти в указанном состоянии среднее значение квадрата суммарного спина системы частиц.

5.28. В условиях предыдущей задачи в частных случаях $n = 1$ и $n = N - 1$ найти вероятности различных значений величины S суммарного спина системы частиц.

5.29. Состояние частицы со спином $s = 1/2$ характеризуется определенными значениями квантовых чисел l, m, s_z . Найти в указанном состоянии вероятности различных значений полного момента $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ частицы.

5.30. Состояние некоторой системы характеризуется определенными значениями квантовых чисел J (момент системы) и $J_z = J$. Найти вероятности различных значений проекции момента J_n на ось, направление которой в пространстве определяется единичным вектором \mathbf{n} .

5.31. Моменты двух слабо взаимодействующих подсистем, равные 1 и $1/2$, складываются в результирующий момент J . В следующих состояниях совокупной системы:

$$a) J = 3/2, J_z = \pm 1/2; б) J = 1/2, J_z = \pm 1/2$$

— найти вероятности различных значений проекций складываемых моментов на ось z и их средние значения. При решении задачи воспользоваться операторами \hat{J}_{\pm} .

5.32. Показать, что спиновая функция системы из N частиц со спином $s = 1/2$, отвечающая состоянию с максимально воз-

можным значением $S = N/2$ суммарного спина, симметрична по отношению к перестановке спиновых переменных любых двух частиц.

Имеют ли определенную симметрию спиновые функции, отвечающие другим значениям суммарного спина? Сравнить со случаем $N = 2$.

5.33. В системе трех частиц со спином $s = 1/2$ имеется восемь различных спиновых состояний. Произвести классификацию этих состояний по значениям суммарного спина системы.

Найти полную систему спиновых функций Ψ_{SS_z} , описывающих состояния с определенными значениями S, S_z суммарного спина.

5.34. Произвести классификацию спиновых состояний системы из четырех частиц со спином $s = 1/2$ по значениям суммарного спина S системы.

5.35. Какие отличные от нуля средние значения мультипольных моментов (d_i — электрического дипольного, μ_i — магнитного дипольного, D_{ik} — электрического квадрупольного) может иметь система, характеризующаяся определенным значением J полного момента, равным:

- а) $J = 0$; б) $J = 1/2$?

§ 2. Пространственные состояния частицы со спином

5.36. Состояния частицы с определенным значением проекции спина на направление импульса называют *спиральными* состояниями. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти волновые функции $\Psi_{p, \lambda}$, описывающие состояния с определенным импульсом p_0 и *спиральностью* $\lambda = \pm 1/2$.

5.37. Указать вид оператора спиральности и показать, что этот оператор коммутирует с оператором полного момента $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ частицы.

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

$$\Psi = (\hat{\sigma} \mathbf{n}) \chi, \text{ т. е. } \Psi_\alpha = \hat{\sigma}_{\alpha\beta} n_\beta \chi_\beta,$$

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

Нормировать на единицу указанную волновую функцию.

Каково распределение по направлениям импульса частицы в указанном состоянии? Сравнить со случаем $s_{1/2}$ -состояния.

Вычислив среднее значение вектора суммарного момента частицы в рассматриваемом состоянии, выяснить, как \bar{j} зависит от конкретного выбора спинора χ . Найти вид функций, описывающих состояния с определенным значением $j_z = \pm 1/2$ проекции полного момента на ось z .

5.39. Произвести анализ состояний частицы со спином $s = 1/2$, волновые функции которых имеют в импульсном представлении спин-угловую зависимость вида

$$\Psi_{\pm} = (1 \pm \hat{\sigma}\mathbf{n})\chi, \quad \mathbf{n} = \mathbf{p}/p$$

(спинор $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ не зависит от вектора \mathbf{n}), по значениям следующих квантовых чисел: полного момента частицы j , орбитального l , четности, спиральности λ .

5.40. Для частицы со спином $s = 1/2$ показать, что наиболее общая спин-угловая зависимость волновой функции состояния $p_{3/2}$ имеет вид

$$\Psi = \{2(\mathbf{c}\mathbf{n}) + i[\mathbf{c}\mathbf{n}]\hat{\sigma}\}\chi$$

(произвольный вектор \mathbf{c} и спинор $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ не зависят от вектора \mathbf{n}).

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

5.41. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти спин-угловую зависимость волновых функций Ψ_{ll_z} состояний с определенными значениями орбитального момента l , полного момента j и проекции j_z полного момента на ось z в случае $j = l + 1/2$.

Задачу предлагается решать следующими двумя способами:

а) используя проекционные операторы \hat{P}_j ;

б) используя повышающие (понижающие) операторы \hat{j}_{\pm} .

5.42. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае $j = l - 1/2$.

5.43. Показать, что функции Ψ_{ll_z} , рассмотренные в двух предыдущих задачах, связаны соотношением

$$\Psi_{ll_1l_z} = (\hat{\sigma}\mathbf{n})\Psi_{ll_2l_z}; \quad l_{1,2} = j \pm 1/2, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (\text{или } \mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{p}).$$

Следствием этого соотношения является одинаковый вид угловых распределений по направлениям импульса частицы в состояниях с заданными значениями j и j_z и различными значениями орбитального момента $l_{1,2} = j \pm 1/2$.

5.44. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти спин-угловую зависимость волновых функций $\Psi_{ll_z\lambda}$ (в импульсном представлении), описывающих состояния частицы с определенными значе-

ниями j полного момента, его проекции j_z на ось z и спиральности λ .

5.45. Для заряженной частицы со спином $s = 1/2$ найти среднее значение вектора магнитного момента в состояниях Ψ_{j, j_z} .

Оператор магнитного момента $\hat{\mu}$ имеет вид

$$\hat{\mu} = \mu_0 \hat{\sigma} + \frac{e\hbar}{2mc} \hat{1},$$

где μ_0 — спиновый магнитный момент частицы (для электрона $\mu_e = -e_0\hbar/2m_e c$, для протона $\mu_p = 2,79e_0\hbar/2m_p c$ и т. д., $e^0 > 0$ — величина заряда электрона), e — ее заряд.

Г л а в а 6

ДВИЖЕНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

§ 1. Бесспиновая заряженная частица в магнитном поле

6.1. Показать, что при определенной калибровке векторного потенциала гамильтониан заряженной частицы в магнитном поле *)

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2$$

можно представить в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{e}{\mu c} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2.$$

Убедиться в эрмитовости гамильтониана.

6.2. Найти оператор скорости $\hat{\mathbf{v}}$ заряженной частицы в магнитном поле. Установить коммутационные соотношения между различными компонентами этого оператора $[\hat{v}_i, \hat{v}_k]$, а также $[\hat{v}_i, \hat{x}_k]$.

6.3. Для заряженной частицы в постоянном однородном магнитном поле найти операторы координат центра орбиты $\hat{\rho}_0$ поперечного (перпендикулярного магнитному полю) движения, квадрата радиуса-вектора этого центра $\hat{\rho}_0^2$ и квадрата радиуса орбиты $\hat{\rho}_\perp^2$.

Установить коммутационные соотношения для этих операторов друг с другом и с гамильтонианом.

6.4. Найти нормированные соответствующим образом волновые функции стационарных состояний и уровни энергии заря-

*) В задачах данной главы используется координатное представление, так что $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \equiv \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$.

женной бесспиновой частицы в однородном магнитном поле при следующих калибровках векторного потенциала:

а) $A_x = 0, A_y = \mathcal{H}_0 x, A_z = 0;$

б) $A_x = -\mathcal{H}_0 y, A_y = 0, A_z = 0.$

6.5. В предыдущей задаче были найдены две полные системы функций $\Psi_{n p_y p_z}$ и $\Psi_{n p_x p_z}$, описывающие стационарные состояния заряженной частицы в однородном магнитном поле \mathcal{H}_0 при двух различных калибровках векторного потенциала. Найти соотношение между этими волновыми функциями.

6.6. Найти волновые функции стационарных состояний и соответствующие им уровни энергии заряженной бесспиновой частицы в однородном магнитном поле, используя следующую калибровку векторного потенциала: $\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathcal{H}_0 \mathbf{r}]$. Какова кратность вырождения энергетических уровней поперечного движения частицы? Нормируемы ли на единицу волновые функции стационарных состояний поперечного движения?

6.7. Найти спектр собственных значений операторов квадратов радиуса-вектора $\hat{\rho}_0^2$ центра орбиты поперечного движения и радиуса орбиты $\hat{\rho}_d^2$ частицы в однородном магнитном поле (см. 6.3).

Показать, что волновые функции $\Psi_{n m p_z}$ стационарных состояний частицы в однородном магнитном поле, найденные в предыдущей задаче, являются собственными функциями этих операторов.

6.8. Охарактеризовать поперечное пространственное распределение заряженной частицы в однородном магнитном поле в стационарных состояниях $\Psi_{n m p_z}$ (см. 6.6) в случае $m = -\frac{e}{|e|} n$.

Специально обсудить случай $n \gg 1$ и произвести предельный переход к классической механике.

6.9. То же, что и в предыдущей задаче, но при $n = 0$. Специально обсудить случай $|m| \gg 1$.

6.10. В задачах 6.4 и 6.6 было установлено, что энергетические уровни поперечного движения заряженной частицы в однородном магнитном поле являются дискретными, причем соответствующие этим уровням собственные функции гамильтониана обладают интересным свойством: согласно 6.4 они не могут быть нормированы на единицу (и таким образом, не описывают частицу, локализованную в ограниченной области пространства), а согласно 6.6 существуют стационарные состояния, в которых частица локализована в ограниченной области пространства.

Объяснить указанное свойство собственных функций: возможность их выбора как нормируемых, так и ненормируемых на единицу. Сравнить со случаем стационарных состояний дискретного спектра частицы в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$.

6.11. Найти уровни энергии и нормированные соответствующим образом волновые функции стационарных состояний заряженной бесспиновой частицы, находящейся во взаимно перпендикулярных однородных магнитном и электрическом полях.

6.12. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции стационарных состояний заряженного сферического осциллятора (заряженная частица в центральном поле $U(r) = kr^2/2$), находящегося в однородном магнитном поле.

В случае слабого магнитного поля найти магнитную восприимчивость осциллятора в основном состоянии.

6.13. То же, что и в предыдущей задаче, для плоского заряженного ротатора (заряженная частица, совершающая движение в плоскости на заданном расстоянии a от некоторой точки), находящегося в однородном магнитном поле, перпендикулярном плоскости вращения.

6.14. Показать, что энергетический спектр поперечного движения заряженной бесспиновой частицы, находящейся в магнитном поле соленоида (соленоид имеет бесконечную длину и круговое сечение, так что магнитное поле вне соленоида равно нулю, а внутри — однородно и направлено вдоль его оси), является непрерывным и магнитное поле не может «связать» частицу, т. е. отсутствуют стационарные состояния, в которых частица локализована в поперечном направлении в ограниченной области пространства.

В пределе, когда радиус соленоида $R = \infty$, получается однородное во всем пространстве магнитное поле, в котором спектр поперечного движения частицы является дискретным и существуют локализованные стационарные состояния (см., например, задачу 6.6). Объяснить, каким образом из непрерывного спектра при $R \neq \infty$ получается дискретный спектр при $R = \infty$.

6.15. Показать, что магнитное поле $\mathbf{H}(\mathbf{r})$, отличное от нуля в ограниченной области пространства, не может «связать» заряженную бесспиновую частицу, т. е. не существует стационарных состояний частицы, в которых она локализована в ограниченной области пространства.

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

Показать, что при наличии в пространстве однородного магнитного поля у заряженной частицы в произвольном поле притяжения $U(r)$, удовлетворяющем условиям $U(r) \leq 0$, $U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, всегда имеются стационарные состояния, в которых она локализована в ограниченной области пространства (и не только в поперечном направлении!), т. е. что при наличии магнитного поля любая яма может «связать» частицу.

§ 2. Частица со спином в магнитном поле

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

6.18. Найти энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний дискретного спектра поперечного движения нейтрона в магнитном поле соленоида.

6.19. Нейтрон находится в стационарном магнитном поле вида

$$\mathcal{H}_\rho = \mathcal{H}_\varphi = 0, \quad \mathcal{H}_z = \mathcal{H}(\rho)$$

(цилиндрическая система координат). Свести задачу нахождения волновых функций стационарных состояний нейтрона и соответствующих им энергетических уровней к решению одномерного волнового уравнения.

6.20. В полупространстве $x > 0$ имеется однородное магнитное поле вида $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0, \mathcal{H}_z = \mathcal{H}_0$. В области $x < 0$ магнитное поле отсутствует. Найти коэффициент отражения поляризованных нейтронов (т. е. нейтронов с определенным значением проекции спина на ось z) от поверхности раздела.

Рассмотреть случаи падения нейтрона как из области пространства, где имеется магнитное поле, так и из области, свободной от магнитного поля. Найти соотношения между углами падения, отражения и преломления. Падающие нейтроны имеют определенный импульс \mathbf{p} .

6.21. Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии заряженной частицы со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ_0 в однородном магнитном поле. Сравнить с результатами задач 6.4 и 6.6.

6.22. Показать, что гамильтониан Паули для электрона (а также и для μ -мезона) в электромагнитном поле может быть представлен в виде

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

Справедливо ли указанное представление гамильтониана для других частиц со спином $s = 1/2$ (протона, нейтрона и т. п.)?

6.23. Показать, что при движении электрона в стационарном магнитном поле проекция спина на направление скорости электрона является интегралом движения.

Сохраняется ли утверждение задачи для произвольной частицы со спином $s = 1/2$?

6.24. Показать, что магнитное поле $\mathcal{H}(\mathbf{r})$, отличное от нуля в ограниченной области пространства, не может «связать» электрон, т. е. не существует стационарных состояний электрона,

в которых он локализован в ограниченной области пространства (сравнить с 6.15).

Сохраняется ли утверждение задачи для других частиц со спином $s = 1/2$?

§ 3. Магнитное поле орбитальных токов и спинового магнитного момента

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

6.26. В условиях предыдущей задачи найти матричные элементы оператора магнитного момента частицы между различными состояниями, относящимися к уровню энергии с главным квантовым числом $n = 2$.

6.27. Установить соотношение между средними значениями векторов орбитального момента $\bar{\Gamma}$ и магнитного момента $\bar{\mu}$ для заряженной бесспиновой частицы, находящейся в магнитном поле.

Показать, что найденное соотношение не противоречит калибровочной инвариантности.

6.28. Найти компоненты плотности тока для заряженной бесспиновой частицы, находящейся в однородном магнитном поле в стационарном состоянии Ψ_{nmp_z} (см. 6.6).

6.29. Найти компоненты плотности тока для заряженной частицы со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ_0 , находящейся в однородном магнитном поле в стационарном состоянии $\Psi_{nmp_z s_z}$ (см. задачу 6.21 и сравнить с результатом предыдущей).

6.30. Электрон находится в кулоновском поле ядра с зарядом Ze в основном состоянии. Найти среднее магнитное поле, создаваемое электроном в пространстве.

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

Г л а в а 7

ИЗМЕНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВО ВРЕМЕНИ

§ 1. Бесспиновые частицы

7.1. Вывести правило дифференцирования по времени произведения двух операторов.

7.2. Найти вид оператора скорости $\hat{v} = \hat{g}$ заряженной бесспиновой частицы, находящейся в произвольном электромагнитном поле. Сравнить с 6.2.

7.3. Найти оператор ускорения $\hat{w} = \hat{v}$ заряженной частицы в электромагнитном поле.

7.4. Показать, что среднее значение производной по времени физической величины, не зависящей явно от времени, в стационарном состоянии дискретного спектра равно нулю.

7.5. Показать, что среднее значение силы, действующей на частицу в стационарном состоянии дискретного спектра, равно нулю.

Задачу предлагается решить двумя способами:

а) используя результат предыдущей задачи; б) непосредственно усредняя оператор силы.

7.6. Доказать теорему вириала в квантовой механике.

Задачу предлагается решить тремя способами:

а) усреднением оператора $d(\hat{p}\hat{r})/dt$ (аналогично тому, как эта теорема доказывается в классической механике);

б) используя экстремальные свойства собственных значений оператора Гамильтона (энергетических уровней системы) и рассматривая масштабное преобразование волновых функций стационарных состояний системы;

в) используя результат задачи 1.28.

7.7. Показать, что для системы N заряженных частиц, движущихся в ограниченной области пространства, справедливо равенство (так называемое «правило сумм»; см. также 14.18)

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

где $(d_i)_{nm}$ — матричные элементы дипольного момента системы, суммирование проводится по всем стационарным состояниям системы, μ и e — масса и заряд каждой частицы.

7.8. Обсудить вопрос о сохранении нормировки волновой функции состояния (в интегральной и локальной форме) частицы в случае, когда ее взаимодействие с внешним полем описывается нелокальным эрмитовым потенциалом, т. е. когда оператор потенциальной энергии (в координатном представлении) является интегральным оператором с ядром $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$:

$$\hat{U}\Psi(\mathbf{r}) \equiv \int U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') dV'.$$

Сравнить с обычным случаем локального потенциала $\hat{U} = U(\mathbf{r})$.

7.9. Рассмотреть уравнение Шредингера, в котором потенциальная энергия является комплексной функцией: $U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) + iU_1(\mathbf{r})$; U_0 , U_1 — вещественные функции (так называемый оптический потенциал).

Выяснить, сохраняется ли во времени нормировка волновой функции при движении частицы в таком поле. Изменение со вре-

менем нормировки волновой функции состояния можно интерпретировать как поглощение (или рождение) частиц во внешнем поле. Как связан знак мнимой части потенциала с характером такого процесса?

7.10. Состояние частицы, находящейся в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$), в начальный момент времени имеет вид

$$\Psi(x, t=0) = A \sin^3 \frac{\pi x}{a}.$$

Найти волновую функцию в произвольный момент времени. Показать, что через некоторое время T частица возвращается в исходное состояние.

7.11. Как изменяется во времени состояние плоского ротатора, если в начальный момент ($t=0$) оно описывалось волновой функцией

$$\Psi(\varphi, t=0) = A \sin^2 \varphi?$$

7.12. Пространственный ротатор при $t=0$ находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi = A \cos^2 \theta$. Найти волновую функцию ротатора в произвольный момент времени.

7.13. Состояние свободной частицы в момент времени $t=0$ описывается волновой функцией вида

$$\Psi(x, t=0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + \frac{imv_0x}{\hbar}\right).$$

Найти изменение состояния частицы во времени и следующие средние: $\overline{x(t)}$, $\overline{p(t)}$, $\overline{(\Delta x(t))^2}$, $\overline{(\Delta p(t))^2}$ (см. также задачи 7.19 и 7.36).

7.14. В условиях предыдущей задачи показать, что ширина волнового пакета $\overline{(\Delta x(t))^2}$ в момент времени t независимо от параметров, определяющих волновую функцию частицы при $t=0$, не может быть произвольно малой.

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

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

составленный из собственных функций $\Psi_E(x)$ гамильтониана частицы, отвечающих энергетическим уровням E непрерывного спектра.

Показать, что в рассматриваемом состоянии плотность вероятности нахождения частицы в любой фиксированной точке пространства при $t \rightarrow \infty$ стремится к нулю (это обстоятельство не противоречит сохранению нормировки волновой функции, так как одновременно с уменьшением плотности вероятности увеличивается ширина пакета — пакет расплывается).

7.16. Состояние частицы в поле δ -функциональной ямы (см. 2.11) в начальный момент времени описывается волновой функцией

$$\Psi(x, t=0) = A \exp(-\beta|x|), \quad \beta > 0.$$

Какова вероятность обнаружить частицу на отрезке $(x, x+dx)$ при $t \rightarrow \infty$? Найти значение интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t=\infty)|^2 dx$$

и сравнить его с первоначальным значением. Объяснить полученный результат.

7.17. Состояние свободной частицы в момент времени $t=0$ описывается нормированной волновой функцией $\Psi_0(x)$ (при этом волновая функция $\Phi_0(p)$ в импульсном представлении также считается известной). Найти асимптотическое поведение волновой функции $\Psi(x, t)$ при $t \rightarrow \infty$. Убедиться в сохранении нормировки волновой функции.

В качестве иллюстрации полученного результата рассмотреть при $t \rightarrow \infty$ вид волнового пакета, обсуждавшегося в 7.13.

7.18. Гармонический осциллятор при $t=0$ находится в состоянии, описываемом волновой функцией вида

$$\Psi(x, t=0) = A \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2} + \frac{ip_0x}{\hbar}\right],$$

где $a = (\hbar/m\omega)^{1/2}$. Найти изменение состояния осциллятора во времени и следующие средние: $\overline{x(t)}$, $\overline{p(t)}$, $\overline{(\Delta x(t))^2}$, $\overline{(\Delta p(t))^2}$ (см. также 7.36).

7.19. Найти временную функцию Грина $G(x, t; x', t')$ для свободной частицы. Эта функция удовлетворяет уравнению Шредингера (по переменным x, t) и при $t=t'$ равна $\delta(x-x')$.

С помощью найденной функции Грина решить задачу 7.13.

Обобщить полученный результат на случай свободного движения частицы в пространстве, т. е. найти функцию Грина $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$.

7.20. Найти временную функцию Грина $G(\mathbf{p}, t; \mathbf{p}', t')$ свободной частицы в импульсном представлении.

7.21. Найти временную функцию Грина в случае свободного движения частицы на полуоси, т. е. в поле

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

7.22. На непроницаемую стенку, описываемую потенциалом предыдущей задачи, падает волновой пакет, имеющий при $t=0$ вид

$$\Psi(x, t=0) = A \exp\left[\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x+x_0)^2}{2a^2}\right]$$

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

Рассмотреть отражение волнового пакета от стенки, используя временную функцию Грина, найденную в предыдущей задаче.

7.23. Для частицы, находящейся в однородном поле $U(x) = -F_0x$, найти временную функцию Грина в импульсном представлении.

7.24. Для частицы, находящейся в однородном поле $U(x) = -F_0x$, найти временную функцию Грина в координатном представлении.

Используя полученный результат, рассмотреть расплывание волнового пакета, имеющего при $t = 0$ вид

$$\Psi(x, t=0) = A \exp\left[\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right].$$

7.25. Найти временную функцию Грина гармонического осциллятора.

7.26. Найти унитарный оператор, соответствующий преобразованию Галилея, т. е. переходу в новую инерциальную систему отсчета. Убедиться в инвариантности уравнения Шредингера относительно этого преобразования.

Как изменяется при этом преобразовании волновая функция частицы в координатном и импульсном представлениях?

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

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

7.29. Найти операторы координаты и импульса в гайзенберговском представлении для свободной частицы.

Задачу предлагается решить двумя способами:

а) используя унитарное преобразование, связывающее операторы физических величин в гайзенберговском и шредингеровском представлениях;

б) непосредственным решением уравнений движения для гайзенберговских операторов.

7.30. То же, что и в предыдущей задаче, для частицы, находящейся в однородном поле $U(x) = -F_0x$.

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

7.32. Для заряженной частицы, находящейся в однородном магнитном поле, найти операторы радиуса-вектора, скорости и импульса частицы в гайзенберговском представлении. Восполь-

зоваться калибровкой векторного потенциала вида $\mathbf{A} = (0, \mathcal{H}_0 x, 0)$ (магнитное поле направлено вдоль оси z).

Задачу предлагается решить двумя способами, указанными в условии 7.29.

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

7.34. Найти значение «разновременного» коммутатора $[[\hat{p}(t), \hat{x}(t')]]$ для:

а) свободной частицы; б) частицы в однородном поле; в) осциллятора.

7.35. Для систем, рассмотренных в 7.29—7.31, найти гамильтониан $\hat{H}(t)$ и сравнить с $\hat{H}(t=0)$.

7.36. Используя вид гайзенберговских операторов $\hat{p}(t), \hat{x}(t)$, найти зависимость от времени следующих средних: $\overline{x(t)}, \overline{p(t)}, \overline{(\Delta x(t))^2}, \overline{(\Delta p(t))^2}$ — для

а) свободной частицы; б) частицы в однородном поле; в) осциллятора

в состоянии, описываемом волновой функцией вида

$$\Psi(x) = A \exp\left[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right].$$

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

Какова связь между операторами физических величин в шредингеровском представлении и представлении взаимодействия? Как изменяются во времени операторы и волновая функция системы в представлении взаимодействия?

7.38. Найти вид операторов координаты и импульса, а также вид волнового уравнения в представлении взаимодействия для частицы в однородном поле, выбрав в качестве невозмущенного гамильтониана оператор Гамильтона свободной частицы.

7.39. То же, что и в предыдущей задаче, для осциллятора.

§ 2. Частицы со спином

7.40. Найти операторы скорости \hat{v} и ускорения \hat{w} (в шредингеровском представлении) нейтральной частицы с отличным от нуля спиновым магнитным моментом (например, нейтрона), находящейся в магнитном поле.

7.41. Найти зависимость от времени спиновой волновой функции и средних значений компонент спина нейтральной частицы

со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ , находящейся в однородном стационарном магнитном поле.

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

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

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

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

где $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1, \omega_0$ — постоянные величины.

При $t = 0$ частица находилась в состоянии с проекцией спина на ось z , равной $s_z = 1/2$. Найти вероятности различных значений проекции спина на ось z в момент времени t . Обсудить, в частности, случай, когда $|\mathcal{H}_0/\mathcal{H}_1| \ll 1$; обратить внимание на резонансный характер зависимости вероятности «переворота» спина от частоты ω_0 в этом случае.

7.45. Для частицы со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ , находящейся в однородном стационарном магнитном поле, найти операторы вектора спина $\hat{\mathbf{s}}(t)$ в гайзенберговском представлении.

Задачу предлагается решить двумя способами:

а) используя унитарное преобразование, связывающее операторы физических величин в гайзенберговском и шредингеровском представлениях;

б) непосредственным решением уравнений движения для гайзенберговских операторов.

Определить зависимость от времени средних значений компонент спина (сравнить с 7.41).

7.46. То же, что и в предыдущей задаче, в случае однородного нестационарного магнитного поля, направление которого остается неизменным.

7.47. Решить задачу 7.44, используя представление взаимодействия (см., например, 7.37) и выбрав в качестве невозмущенного гамильтониана

$$\hat{H}_0 = -\mu \mathcal{H}_1 \hat{\sigma}_z.$$

7.48. Частица со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ находится в однородном стационарном магнитном поле вида

$$\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_0, \quad \mathcal{H}_y = 0, \quad \mathcal{H}_z = \mathcal{H}_1.$$

Используя представление взаимодействия (см., например, 7.37) с невозмущенным спиновым гамильтонианом $\hat{H}_0 =$

$= -\mu \mathcal{H}_1 \hat{\sigma}_z$, найти вероятности различных значений проекции спина на ось z в момент времени t , если при $t=0$ проекция спина частицы на ось z равна $s_z = 1/2$.

7.49. В условиях задачи 7.41 найти временную спиновую функцию Грина $G_{\alpha\beta}(t, t')$ частицы (индексы $\alpha, \beta = 1, 2$ описывают спиновую переменную, т. е. α, β — спинорные индексы).

7.50. То же в условиях задачи 7.42.

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

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

Глава 8

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ.

ВНЕЗАПНЫЕ И АДИАБАТИЧЕСКИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ

§ 1. Стационарная теория возмущений

8.1. Для частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$), найти в первом

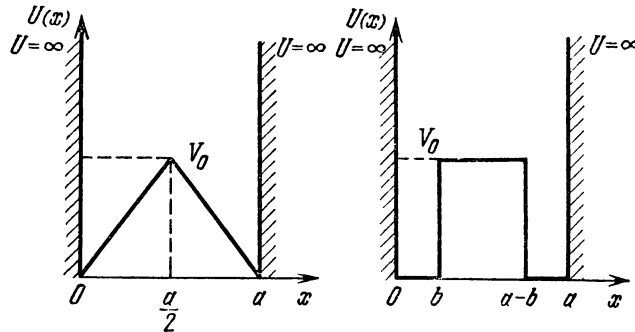


Рис. 16.

порядке теории возмущений смещение энергетических уровней под действием возмущения вида (рис. 16):

$$a) V(x) = \frac{V_0}{a} (a - |2x - a|);$$

$$б) V(x) = \begin{cases} V_0, & b < x < a - b, \\ 0, & 0 < x < b, \quad a - b < x < a. \end{cases}$$

Указать условия применимости полученного результата.

8.2. Показать, что поправка первого порядка $E_n^{(1)}$ к энергетическим уровням частицы из предыдущей задачи для произвольного возмущения $V(x)$ при достаточно больших значениях n не зависит от n .

8.3. На заряженный линейный осциллятор наложено однородное электрическое поле \mathcal{E} , направленное вдоль оси колебаний. Рассматривая действие электрического поля как возмущение, рассчитать в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетических уровней осциллятора. Полученный результат сравнить с точным решением (см. 2.6).

8.4. Представим гамильтониан осциллятора в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} + \frac{\alpha x^2}{2}.$$

Рассматривая формально слагаемое $\alpha x^2/2$ как возмущение, рассчитать в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетических уровней осциллятора. Ответ сравнить с точным решением. Каково условие сходимости ряда теории возмущений?

8.5. На частицу в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$) наложено возмущение вида

$$V(x) = V_0 \cos^2 \frac{\pi x}{a}.$$

Рассчитать изменение энергетических уровней частицы в первых двух порядках теории возмущений.

8.6. В условиях предыдущей задачи найти поправку третьего порядка к энергии основного состояния частицы.

8.7. Найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетических уровней частицы в условиях задачи 8.1 под действием возмущения $V(x) = \alpha \delta(x - a/2)$. Указать условия применимости полученного результата.

8.8. Как известно, приближенное вычисление собственных функций гамильтониана по теории возмущений в первом порядке приводит к выражению вида

$$\Psi_n \approx \Psi_n^{(0)} + \sum_k c_{nk}^{(1)} \Psi_k^{(0)}; \quad c_{nk}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad k \neq n,$$

а значение коэффициента $c_{nn}^{(1)}$ остается неопределенным (и обычно выбирается равным нулю: $c_{nn}^{(1)} = 0$).

Объяснить происхождение этой неопределенности в значении $c_{nn}^{(1)}$. Сохраняется ли подобная неопределенность при вычислении $c_{nn}^{(p)}$ в высших порядках теории возмущений?

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

8.10. В условиях предыдущей задачи найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиг и расщепление энергетических уровней возбужденных состояний ротатора. Указать правильные функции нулевого приближения. Специально обсудить случай первого возбужденного уровня.

8.11. Пространственный ротатор с моментом инерции I и дипольным моментом \mathbf{d} , параллельным оси ротатора, помещен в однородное электрическое поле \mathcal{E}_0 , рассматриваемое как возмущение. Найти поляризуемость основного состояния ротатора.

8.12. В условиях предыдущей задачи рассчитать в первом исчезающем порядке теории возмущений сдвиг энергетических уровней возбужденных состояний ротатора. Каков при этом характер снятия вырождения уровней? Происходит ли в высших порядках теории возмущений дальнейшее снятие вырождения?

8.13. Найти расщепление первого возбужденного уровня энергии плоского гармонического осциллятора под действием возмущения вида $V = \alpha xy$ (плоскость x, y — плоскость колебаний) в первом порядке теории возмущений. Указать правильные функции нулевого приближения. Сравнить с точным решением.

8.14. То же, что и в предыдущей задаче, для второго возбужденного уровня энергии осциллятора.

8.15. Частица находится внутри непроницаемого эллипсоида вращения, т. е.

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

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

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

8.17. Частица находится в центральном поле вида

$$U(r) = -\frac{U_0}{\exp(r/a) - 1},$$

причем $ma^2U_0/\hbar^2 \gg 1$. В первом порядке теории возмущений найти отличие энергетических уровней нижней части спектра от уровней энергии в кулоновском поле $\mathcal{U}(r) = -U_0a/r$. Обратит внимание на снятие «случайного» кулоновского вырождения уровней. Указать условие применимости полученного результата.

8.18. То же, что и в предыдущей задаче, для потенциала Юкавы $U(r) = -\alpha \exp(-r/a)/r$ при условии $m\alpha a/\hbar^2 \gg 1$.

8.19. Найти приближенный вид волновых функций стационарных состояний и энергетические уровни нижней части спектра плоского ротатора, имеющего дипольный момент \mathbf{d} , в сильном электрическом поле \mathcal{E}_0 , таком, что $l d \mathcal{E}_0 / \hbar^2 \gg 1$. Указать условие применимости результата.

8.20. Для частицы, находящейся в центральном поле вида

$$U(r) = -\alpha/r^p, \quad 0 < p < 2,$$

найти энергетические уровни $E_{n_r, l}$ дискретного спектра с большим значением момента $l \gg 1$ (и не слишком большим значением радиального квантового числа n_r). Указать условие применимости полученного результата. В случае кулоновского поля ($p = 1$) сравнить с точным решением задачи.

8.21. Найти энергетические уровни «поперечного» движения заряженной частицы в поле бесконечной однородно заряженной нити при больших значениях проекции момента частицы на направление нити. Указать условия применимости полученного результата.

8.22. Основываясь на результатах задач 2.57 и 2.59, в которых была установлена интегральная форма уравнения Шредингера и для коэффициентов отражения и прохождения частиц получены выражения через значения волновой функции в области действия потенциала, обсудить возможность вычисления этих коэффициентов по теории возмущений (в первом порядке). Указать условия применимости проведенного рассмотрения. Сравнить с результатом 8.37.

Применить полученный результат к полю $U(x)$, допускающему точное решение задачи (например, 2.47, 2.48, 2.52).

§ 2. Нестационарная теория возмущений.

Переходы в непрерывном спектре

8.23. На частицу, находящуюся при $t \rightarrow -\infty$ в основном состоянии в бесконечно глубокой яме шириной a , накладывается слабое однородное поле, изменяющееся во времени по закону:

а) $V(x, t) = -x F_0 \exp(-t^2/\tau^2)$;

б) $V(x, t) = -x F_0 \exp(-|t|/\tau)$;

в) $V(x, t) = -x F_0 / [1 + (t/\tau)^2]$.

Вычислить в первом порядке теории возмущений вероятности возбуждения различных состояний частицы при $t \rightarrow \infty$. Указать условия применимости полученных результатов.

8.24. Линейный осциллятор подвергается воздействию однородного электрического поля, изменяющегося во времени по закону:

а) $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \exp[-(t/\tau)^2]$;

б) $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \exp(-|t|/\tau)$.

Считая, что до включения поля (при $t \rightarrow -\infty$) осциллятор находился в n -м стационарном состоянии, найти в первом по-

рядке теории возмущений вероятности возбуждения различных его состояний при $t \rightarrow \infty$.

8.25. Решить предыдущую задачу для поля, изменяющегося по закону

$$\mathcal{E}(t) \propto [1 + (t/\tau)^2]^{-1},$$

при заданном импульсе силы P_0 . Обсудить предельные случаи $\omega\tau \ll 1$ и $\omega\tau \gg 1$.

8.26. На плоский ротатор, имеющий дипольный момент \mathbf{d} , накладывается однородное, переменное во времени электрическое поле $\mathcal{E}(t) = f(t)\xi_0$. До включения поля ротатор имел определенное значение m проекции момента. Вычислить в первом порядке теории возмущений вероятности различных значений проекции момента и энергии ротатора при $t \rightarrow \infty$. Рассмотреть конкретные зависимости $\mathcal{E}(t)$ вида, указанного в условии задачи 8.24.

8.27. Решить задачу, аналогичную предыдущей, для пространственного ротатора, дипольный момент которого параллелен его оси. До включения поля ротатор находился в состоянии с квантовыми числами $l, l_z = m$; электрическое поле направлено вдоль оси z .

8.28. Получить выражение для амплитуды перехода системы из начального (при $t \rightarrow -\infty$) n -го состояния дискретного спектра в конечное (при $t \rightarrow +\infty$) k -е во втором порядке нестационарной теории возмущений. Предполагается, что возмущение при $t \rightarrow \pm\infty$ равно нулю.

8.29. Как известно, применение нестационарной теории возмущений к расчету вероятностей перехода системы из начального n -го состояния в конечное k -е в первом порядке приводит к амплитудам перехода, равным

$$a_{kn} \approx a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} dt; \quad k \neq n,$$

$$a_{nn} \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{nn}(t) dt.$$

Величина $W_n = |a_{nn}|^2$ представляет вероятность системе остаться в первоначальном состоянии. Если воспользоваться приведенным выше выражением для амплитуды a_{nn} , то получится $W_n > 1$, что противоречит сохранению нормировки волновой функции состояния. Объяснить возникающий парадокс и получить закон сохранения нормировки волновой функции состояния с учетом переходов в первом порядке теории возмущений.

8.30. В условиях задачи 8.24 найти во втором порядке теории возмущений вероятности переходов осциллятора, запрещен-

ных в первом порядке*). Сравнить вероятности $W(n \rightarrow n \pm 2)$ и $W(n \rightarrow n \pm 1)$.

8.31. На плоский ротатор, имеющий дипольный момент \mathbf{d} и находящийся в основном состоянии, накладывается слабое однородное электрическое поле $\mathcal{E}(t) \equiv \mathcal{E}(t) \mathbf{n}_0$, лежащее в плоскости вращения ротатора и изменяющееся во времени по закону

$$\mathcal{E}(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \mathcal{E}_0 \exp(-t/\tau), & t > 0. \end{cases}$$

Найти во втором порядке нестационарной теории возмущений вероятности переходов ротатора (при $t \rightarrow \infty$), запрещенных в первом порядке. Сравнить со значениями вероятностей переходов, разрешенных в первом порядке теории возмущений.

8.32. То же, что и в предыдущей задаче, но для пространственного ротатора, находящегося до включения поля в основном состоянии (см. также 8.27).

8.33. На систему, находящуюся при $t < 0$ в n -м стационарном состоянии дискретного спектра гамильтониана H_0 , при $t > 0$ накладывается возмущение вида $V(t) = V_0 \sin \omega_0 t$, где V_0 от времени не зависит. Найти волновую функцию системы при $t > 0$ в первом порядке теории возмущений. Указать условия применимости рассмотрения. Специально обсудить случай, когда частота возмущения ω_0 близка к одной из частот перехода $\omega_{kn}^{(0)} = (E_k^{(0)} - E_n^{(0)})/\hbar$ (k -е состояние также относится к дискретному спектру гамильтониана H_0).

8.34. На систему, находящуюся при $t \rightarrow -\infty$ в n_1 -м стационарном состоянии дискретного спектра гамильтониана H_0 , относящегося к двукратно вырожденному уровню $E_n^{(0)}$, накладывается возмущение вида $V = V_0 f(t)$, где V_0 от времени не зависит, $|f| \leq 1$, $f(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow -\infty$. Найти волновую функцию системы в «нулевом» приближении в произвольный момент времени. Для простоты считать, что матричные элементы возмущения обладают свойствами

$$(V_0)_{n_1 n_1} = (V_0)_{n_2 n_2} = 0, \quad (V_0)_{n_1 n_2} = (V_0)_{n_2 n_1} \equiv V_0;$$

n_1, n_2 — два независимых состояния, относящихся к двукратно вырожденному уровню $E_n^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана H_0 .

При выполнении какого условия для вычисления волновой функции $\Psi(t)$ в первом порядке теории возмущений можно использовать стандартный подход, изложенный, например, в решении задачи 8.28?

8.35. На частицу, находящуюся при $t < 0$ в основном состоянии в поле $U(x) = -\alpha \delta(x)$ (см. 2.11), при $t > 0$ накладывается слабое однородное поле вида $V(x, t) = -x F_0 \sin \omega_0 t$.

*) То есть таких переходов, для которых $W^{(1)}(n \rightarrow k) = 0$.

Найти вероятность $W_0(t)$ того, что частица к моменту t останется связанной в поле ямы. Считать $\hbar\omega_0 \gg |E_0|$ ($|E_0|$ — энергия связи частицы; для частиц с энергией $E \gg |E_0|$ действие потенциала можно рассматривать как возмущение, см. 8.22 и 8.37).

8.36. Решить предыдущую задачу при произвольной частоте ω_0 возмущения. Может ли частица «покинуть» яму, если $\hbar\omega_0 < |E_0|$?

8.37. Частица находится в одномерном поле $U(x)$; $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$. Рассматривая действие поля как возмущение, найти коэффициенты отражения и прохождения частиц с энергией E с помощью теории возмущений в непрерывном спектре. Указать условия применимости рассмотрения. Сравнить с результатом задачи 8.22.

§ 3. Внезапные воздействия

8.38. В рамках нестационарной теории возмущений получить выражения для вероятностей переходов системы под действием возмущений, характеризующихся следующей временной зависимостью:

а) мгновенное включение: $\mathcal{V}(t) = \mathcal{V}_0\eta(t)$, т. е.

$$\hat{\mathcal{V}}(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \hat{\mathcal{V}}_0, & t > 0 \end{cases} \quad (\hat{\mathcal{V}}_0 \text{ от времени не зависит});$$

б) «импульсное» действие: $\mathcal{V}(t) = \mathcal{W}_0\delta(t)$.

Каково условие применимости полученных выражений, если включение (и выключение в случае б)) возмущения происходит не мгновенно, а за конечное время τ ?

8.39. Система, описываемая гамильтонианом \hat{H}_0 , находится в n -м стационарном состоянии дискретного спектра. При $t = 0$ гамильтониан системы внезапно изменяется и становится равным (при $t > 0$) $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\mathcal{V}}_0$ (\hat{H}_0 , $\hat{\mathcal{V}}_0$ от времени не зависят). Найти вероятности различных стационарных состояний системы при $t > 0$. В случае малого возмущения $\hat{\mathcal{V}}_0$ сравнить с результатом предыдущей задачи.

8.40. Гамильтониан системы имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_0 + \mathcal{W}_0\delta(t)$. При $t < 0$ система находилась в n -м стационарном состоянии дискретного спектра. Найти вероятности различных стационарных состояний системы при $t > 0$. Для слабого возмущения $\mathcal{V} = \mathcal{W}_0\delta(t)$ сравнить с результатом задачи 8.38.

Для случая $\mathcal{W}_0 = -xP_0$ дать наглядную интерпретацию полученного результата.

8.41. Частица находится в основном состоянии в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a ($0 < x < a$). В некоторый момент времени правая стенка ямы за короткий интервал времени τ смещается в точку b ($b > a$). Найти вероятности возбуждения различных стационарных состояний частицы

после остановки стенки. Указать условия применимости полученных результатов. Рассмотреть случай $b = 2a$.

8.42. Частица находится в основном состоянии в мелкой прямоугольной потенциальной яме шириной a . Внезапно ширина ямы изменяется до значения $b \sim a$, глубина ямы при этом не изменяется. Какова вероятность того, что при этом частица покинет яму? Какова средняя энергия частицы, покидающей яму?

8.43. Решить задачу типа предыдущей в случае, когда внезапно изменяется в n раз ($n \sim 1$) потенциальная энергия, т. е. глубина ямы, а ширина ямы остается неизменной.

8.44. Частица находится в основном состоянии в δ -функциональной яме, т. е. $U(x) = -\alpha\delta(x)$. Внезапно параметр α , характеризующий «глубину» ямы, изменяется и становится равным $\tilde{\alpha}$. Найти распределение по импульсам частиц, покидающих яму в результате такого процесса. Считать, что волновые функции непрерывного спектра можно аппроксимировать плоскими волнами. Указать условия применимости полученного результата.

8.45. Частица находится в основном состоянии в поле $U(x) = -\alpha\delta(x)$. При $t = 0$ яма начинает двигаться со скоростью V . Найти вероятность того, что яма увлечет частицу за собой.

8.46. На заряженный осциллятор, находящийся в основном состоянии, внезапно накладывается однородное электрическое поле, направленное вдоль оси колебаний. Найти вероятности возбуждения различных состояний осциллятора после включения поля.

8.47. У линейного осциллятора, находящегося в основном состоянии, в момент времени $t = 0$ «точка подвеса» начинает двигаться с постоянной скоростью V . Найти вероятности возбуждения различных состояний осциллятора при $t > 0$.

§ 4. Адиабатическое приближение

а) *Адиабатическое приближение в нестационарных задачах.*

8.48. Гамильтониан $H(\hat{p}, q, \lambda(t))$ некоторой системы, совершающей одномерное финитное движение*), явно зависит от времени. Для каждого момента времени t предполагаются известными спектр собственных значений $E_n(t)$ «мгновенного» гамильтониана и полная система соответствующих ортонормированных собственных функций $\Psi_n(q, t)$.

Записать волновое уравнение для системы в представлении, базисом которого является система функций $\Psi_n(q, t)$.

8.49. Гамильтониан системы, охарактеризованной в предыдущей задаче, является медленно меняющейся функцией времени t . Предполагая систему находящейся при $t = 0$ в n -м квантовом

*) Ограничение одномерными системами, используемое в задачах 8.48 и 8.49, не является принципиальным, и рассмотрение, проведенное в этих задачах, может быть обобщено на системы с несколькими степенями свободы.

состоянии, найти ее волновую функцию при $t > 0$ в первом порядке адиабатической теории возмущений и указать условия применимости результата.

8.50. На заряженный осциллятор, находящийся при $t \rightarrow -\infty$ в основном состоянии, накладывается однородное электрическое поле вида:

$$а) \mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \exp(-|t|/\tau);$$

$$б) \mathcal{E}(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \mathcal{E}_0(1 - e^{-t/\tau}), & t > 0. \end{cases}$$

Найти вероятности возбуждения различных состояний осциллятора при $t \rightarrow +\infty$ в первом порядке адиабатической теории возмущений. Указать условия применимости полученных результатов.

8.51. На плоский ротатор, имеющий дипольный момент d и находящийся в основном состоянии, при $t > 0$ накладывается однородное электрическое поле вида $\xi(t) = \mathcal{E}(t) n_0$, где $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0[1 - \exp(-t/\tau)]$. Найти функцию распределения по проекциям момента ротатора при $t \rightarrow +\infty$ в случае $d\mathcal{E}_0 l \gg \hbar^2$, но $d\mathcal{E}_0 l^2 \ll \tau \hbar^3$ (сильное медленно включаемое поле).

8.52. Частица находится в поле двух δ -функциональных ям

$$U(x, t) = -\alpha [\delta(x - L(t)/2) + \delta(x + L(t)/2)].$$

При $t \rightarrow -\infty$ ямы находились на бесконечно большом расстоянии друг от друга и частица была связана одной из ям. Расстояние между ямами $L(t)$ медленно уменьшается, и в некоторый момент времени T ямы «сливаются» в одну: $U(x) = -2\alpha\delta(x)$. Какова вероятность того, что при этом частица останется в связанном состоянии?

б) *Адиабатическое приближение в стационарных задачах.*

8.53. Гамильтониан системы, состоящей из двух подсистем, имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_1(x) + V(x, \xi) + \hat{H}_2(\xi),$$

где x, ξ — координаты 1-й и 2-й подсистем, $V(x, \xi)$ описывает взаимодействие между ними. Считая, что характерные частоты 1-й («быстрой») подсистемы много больше характерных частот 2-й («медленной»), свести задачу приближенного вычисления энергетических уровней и соответствующих им волновых функций совокупной системы к решению уравнений Шредингера для отдельных подсистем.

8.54. Частица находится в двумерном поле $U(x, y)$ вида

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} \leq 1, \\ \infty, & \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} > 1, \end{cases}$$

причем $b \gg a$. Найти энергетические уровни нижней части спектра и соответствующие им волновые функции.

8.55. Частица находится внутри непроницаемого эллипсоида вращения, т. е.

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

причем $b \ll a$ (сильно сплюснутый эллипсоид). Найти энергетические уровни нижней части спектра и соответствующие им волновые функции.

8.56. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае $b \gg a$ (сильно вытянутый эллипсоид).

8.57. Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2M} + \frac{k(x^2 + y^2)}{2} + \alpha xy, \quad |\alpha| < k,$$

причем $M \gg m$ (два связанных осциллятора с сильно различающимися массами). Найти уровни энергии системы и соответствующие им волновые функции, используя адиабатическое приближение.

Указанная задача допускает точное решение. Найти его и сравнить с результатом адиабатического рассмотрения.

8.58. Две частицы с сильно различающимися массами $M \gg \gg m$ находятся в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a . Частицы взаимодействуют друг с другом как непроницаемые точки, т. е.

$$U_{\text{вз}}(x_1, x_2) = \begin{cases} 0, & |x_1 - x_2| > \varepsilon, \quad \varepsilon \ll a, \\ \infty, & |x_1 - x_2| < \varepsilon \end{cases}$$

($x_{1,2}$ — координаты частиц). Найти энергетические уровни нижней части спектра и соответствующие им волновые функции.

Г л а в а 9

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

§ 1. Квантование энергетических уровней.

Квазиклассические волновые функции

9.1. Получить квазиклассическое выражение для уровней энергии линейного гармонического осциллятора. Указать условие применимости полученного результата. Сравнить с точным решением.

9.2. Получить правило квантования энергетических уровней и найти соответствующие им квазиклассические волновые функции в случае потенциала вида, приведенного на рис. 17.

9.3. Получить квазиклассическое выражение для уровней энергии частицы в однородном поле тяжести в случае, когда ее движение ограничено снизу идеально отражающей плоскостью. Указать условие применимости полученного результата (не

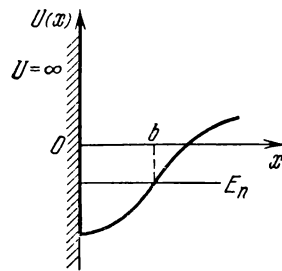


Рис. 17.

смотря на то, что для нижних энергетических уровней $n \sim 1$ квазиклассическое приближение формально неприменимо, полезно сравнить полученный результат для $n=0$ с точным значением энергии основного состояния (см. 2.15)).

9.4. Для частицы, находящейся в поле

$$U(x) = U_0 |x/a|^\nu; \quad U_0 > 0, \quad \nu > 0,$$

найти в квазиклассическом приближении, как изменяется расстояние между соседними уровнями энергии с увеличением n в зависимости от значения параметра ν . Какова плотность состояний дискретного спектра?

9.5. Найти в квазиклассическом приближении плотность состояний дискретного спектра частицы, находящейся в одномерной потенциальной яме с одним минимумом у потенциальной энергии.

9.6. Потенциальная энергия частицы вблизи точки x_0 имеет вид $U(x) \approx \pm \alpha |x - x_0|^{-\nu}$; $\nu > 0$. При каких значениях параметра ν решение уравнения Шредингера в окрестности этой точки имеет квазиклассический вид? Имеет ли решение квазиклассический вид при $\nu = 2$?

9.7. Для частицы в центральном поле $U(r) = -\alpha r^{-\nu}$; $\alpha > 0$, $\nu > 0$, выяснить, в какой области пространства решение уравнения Шредингера для s -состояния с энергией $E = 0$ имеет квазиклассический вид.

9.8. Используя квазиклассическое приближение, найти верхние энергетические уровни дискретного спектра (т. е. уровни с $E_n \rightarrow 0$) частицы в поле $U(x)$ вида

$$U(x) = \begin{cases} -\alpha/x^2, & x > a \quad (a > 0), \\ \infty, & x < a. \end{cases}$$

Указать условия применимости результата.

9.9. Получить в квазиклассическом приближении волновые функции и энергетические уровни s -состояний частицы в кулоновском поле $U(r) = -\alpha/r$. Результат сравнить с точным решением задачи.

9.10. Обобщить результат предыдущей задачи на случай центрального поля вида $U(r) = -\alpha r^{-\nu}$; $0 < \nu < 2$.

9.11. Обобщить результат задачи 9.9 на случай стационарных состояний частицы в кулоновском поле с отличным от нуля моментом.

9.12. Используя квазиклассическое приближение, найти значения параметров потенциала

$$U(x) = -\frac{U_0 a^4}{(x^2 + a^2)^2},$$

отвечающие появлению новых состояний дискретного спектра частицы при углублении ямы. Указать условия применимости результата.

9.13. То же, что и в предыдущей задаче, в случае потенциала

$$U(x) = -\frac{U_0 a^4}{a^4 + x^4}.$$

9.14. Частица находится в потенциальной яме $U(x)$, имеющей при $x \rightarrow \pm\infty$ вид $U(x) \propto |x|^{-\nu}$; $\nu > 2$.

Получить в квазиклассическом приближении формулу, определяющую значения параметров потенциала, при которых в поле появляются новые состояния дискретного спектра по мере углубления ямы.

9.15. Для частицы, находящейся в поле $U(x) = U_0 |x/a|^\nu$ ($U_0 > 0$, $\nu > 0$), выяснить, при каких значениях параметра ν можно использовать стандартные формулы квазиклассического рассмотрения: правило квантования Бора — Зоммерфельда и условия сшивания квазиклассических волновых функций в окрестности точек поворота, основанные на линейной аппроксимации потенциальной энергии.

9.16. Исходя из правила квантования Бора — Зоммерфельда, получить выражение для смещения энергетических уровней частицы при изменении потенциальной энергии на малую величину $\delta U(x)$.

Показать, что результат согласуется с полученным в первом порядке стационарной теории возмущений.

9.17. Доказать теорему вириала в рамках квазиклассического приближения.

9.18. Считая известным энергетический спектр частицы E_n , найти ее среднюю кинетическую энергию в n -м стационарном состоянии при $n \gg 1$.

9.19. В квазиклассическом приближении найти матричные элементы F_{mn} оператора F вида $F = F(x)$ в случае $|m - n| \sim 1$, т. е. между близкими по энергии состояниями. Установить соответствие между матричными элементами F_{mn} и фурье-компонентами F_s функции $F(x(t))$ в классической механике:

$$F(x(t)) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \tilde{F}_s e^{is\omega t}, \quad \tilde{F}_s = \frac{1}{T} \int_0^T F(x(t)) e^{-is\omega t} dt,$$

где $T = 2\pi/\omega$ — период движения в рассматриваемом поле классической частицы с энергией, равной $E_n \approx E_m$.

Найти в квазиклассическом приближении матричные элементы координаты осциллятора и сравнить их с точными значениями.

9.20. Обобщить результат предыдущей задачи на случай оператора $F = F(\hat{p})$. Функцию $F(z)$ считать представимой в виде ряда $F = \sum c_k z^k$.

9.21. Поле $U(x)$ представляет собой две одинаковые потенциальные ямы (I и II, см. рис. 18), разделенные барьером. Если бы барьер был непроницаем для частицы, то существовали бы

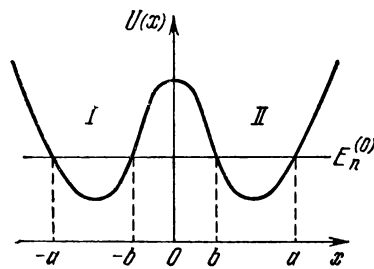


Рис. 18.

уровни энергии, отвечающие движению частицы только в одной из ям (первой или второй), одинаковые для обеих ям. Возможность прохождения через барьер приводит к снятию вырождения и расщеплению каждого из этих уровней на два близких уровня, соответствующих состояниям, в которых частица движется одновременно в обеих ямах.

Определить величину расщепления уровней в квазиклассическом приближении.

9.22. Используя квазиклассическое рассмотрение, получить правило квантования момента и найти асимптотический вид шаровых функций Y_{lm} .

Указать условия применимости полученных результатов.

9.23. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае $l - |m| \sim 1$ ($|m| \gg 1$).

9.24. То же, что и в предыдущих двух задачах, в случае $|m| \sim 1$.

9.25. Исходя из решения уравнения Шредингера для линейного осциллятора в квазиклассическом приближении, найти асимптотику полиномов Эрмита $H_n(x)$ при $n \rightarrow \infty$ (и фиксированном x).

§ 2. Прохождение через потенциальные барьеры

9.26. Вычислить в квазиклассическом приближении коэффициент прозрачности параболического барьера вида

$$U(x) = \begin{cases} U_0(1 - x^2/a^2), & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

Указать критерий применимости полученного результата (при этом специально обсудить случай медленных частиц $E \rightarrow 0$).

9.27. Оценить в квазиклассическом приближении коэффициент прозрачности барьера вида

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0(1 - x/a), & x > 0. \end{cases}$$

Какова точность полученного результата (сравнить с 9.31 и 9.32)?

9.28. То же, что и в предыдущей задаче, для барьера вида

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0 \exp(-x/a), & x > 0 \end{cases}$$

(см. также 9.31).

9.29. Вычислить в квазиклассическом приближении коэффициент прозрачности барьера

$$U(x) = \frac{U_0}{\operatorname{ch}^2(x/a)}.$$

Полученный результат сравнить с точным (см. 2.52).

9.30. В квазиклассическом приближении найти коэффициент прозрачности барьера

$$U(x) = \frac{U_0 a^2}{x^2 + a^2}$$

при достаточно малой энергии частиц.

9.31. Найти предэкспоненциальный множитель в квазиклассическом выражении для коэффициента прозрачности барьера вида

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ \tilde{U}(x), & x > 0 \end{cases}$$

(предполагается, что при $x > 0$ выполнены условия применимости квазиклассического рассмотрения).

9.32. В выражении для коэффициента прозрачности барьера, рассмотренного в 9.27, сделать поправку на предэкспоненциальный множитель согласно результату предыдущей задачи и сравнить с точным решением (см. 2.53).

9.33. Обсудить условия применимости стандартного квазиклассического выражения для коэффициента прозрачности барьера

$D(E) = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx\right]$ в случае потенциала, убывающего при $x \rightarrow \pm\infty$ степенным образом: $U(x) \propto |x|^{-\nu}$ — для малых энергий частицы $E \rightarrow 0$. Найти закон убывания $D(E)$ при $E \rightarrow 0$, когда эти условия выполнены.

9.34. Найти коэффициент прохождения частиц через квазиклассический барьер при энергии частиц $E_0 = U_{\max} \equiv U(x_0)$, т. е. равной максимальному значению потенциальной энергии

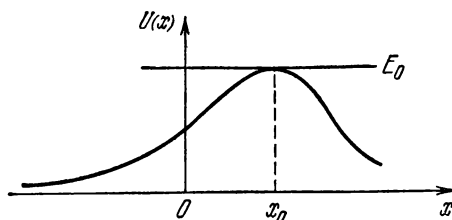


Рис. 19.

(рис. 19). Предполагается $U''(x_0) \neq 0$. Указать условия применимости полученного результата и в случае потенциала, указанного в задаче 9.29, сравнить с точным значением (см. 2.52).

Г л а в а 10

ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

§ 1. Симметрия волновых функций

10.1. Для системы из двух одинаковых частиц со спином s найти число различных спиновых состояний, симметричных и антисимметричных по отношению к перестановке спиновых переменных обеих частиц.

Каков характер симметрии спиновых состояний с определенным значением суммарного спина обеих частиц?

10.2. Пусть функции $\varphi_{f_i}(\mathbf{r})$ представляют пространственные части волновых функций стационарных состояний частицы в некотором внешнем поле. Две такие одинаковые частицы, имеющие спин s и слабо взаимодействующие друг с другом, находятся в этом поле в орбитальных состояниях с заданными квантовыми числами f_1 и f_2 .

Найти общее число состояний с учетом спиновых степеней свободы, считая, что частицы являются: а) бозонами; б) фермионами.

Рассмотреть случаи одинаковых и различных квантовых чисел $f_{1,2}$.

10.3. Показать, что если n тождественных частиц со спином s находятся в различных орбитальных состояниях $\varphi_{f_1}(\mathbf{r}), \varphi_{f_2}(\mathbf{r}), \dots, \varphi_{f_n}(\mathbf{r})$, то общее число состояний с учетом спиновых степеней свободы равно $G = (2s + 1)^n$ независимо от того, какой статистике подчиняются частицы.

10.4. Пусть $\psi_{f_i}(\xi)$ являются нормированными на единицу волновыми функциями одночастичных состояний (f_i — совокупность квантовых чисел полного набора; $\xi = (\mathbf{r}, \sigma)$, σ — спиновая переменная). Написать нормированные на единицу волновые функции состояний системы из трех тождественных бозонов, находящихся в состояниях с квантовыми числами f_1, f_2, f_3 .

10.5. Три тождественных бозона со спином $s = 1$ находятся в одинаковых орбитальных состояниях, описываемых волновыми функциями $\varphi(\mathbf{r})$. Написать нормированные волновые функции возможных независимых состояний системы указанного вида с учетом спиновых степеней свободы. Каково число таких состояний?

10.6. Три одинаковых, слабо взаимодействующих друг с другом бозона со спином $s = 0$ находятся в стационарных состояниях с одинаковыми квантовыми числами n, l , причем $l = 1$, в некотором центральном поле. Каково число различных состояний системы указанного вида?

10.7. В условиях предыдущей задачи показать, что суммарный момент L системы трех бозонов не может принимать значения $L = 0$.

10.8. Для состояния системы из двух одинаковых бозонов со спином $s = 0$, описываемого нормированной волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, указать вероятность того, что одна частица находится в объеме dV_1 , а другая — в dV_2 . Убедиться в правильности нормировки полученного выражения.

Каковы вероятности того, что

- а) обе частицы находятся внутри некоторого объема V ;
- б) одна частица находится внутри объема V , а другая — вне этого объема?

10.9. В системе из двух одинаковых бозонов со спином $s = 0$ одна частица находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi_1(\mathbf{r})$, а другая — $\psi_2(\mathbf{r})$. Эти функции нормированы на единицу и имеют определенные, причем противоположные, четности. Найти в указанном состоянии системы распределение по координатам одной частицы при произвольном (не фиксированном) положении другой. Каковы вероятности того, что

- а) одна частица; б) обе частицы
- находятся в области пространства $z \geq 0$? Сравнить полученные значения со случаем различных частиц.

10.10. Решить задачу, аналогичную предыдущей, для случая системы, состоящей из двух одинаковых фермионов, находящихся в одном и том же спиновом состоянии.

10.11. Для системы из двух одинаковых бозонов со спином $s = 0$ найти функцию распределения по относительному расстоянию между частицами. Как проявляется в полученном распределении тождественность частиц? Какой смысл имеет

выражение

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

($\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — нормированная волновая функция системы)?

10.12. Как известно, в задаче двух тел движение центра масс и относительное движение независимы. Убедиться в том, что условие симметрии волновой функции системы тождественных частиц по отношению к их перестановке не нарушает этой независимости.

10.13. Какие значения может принимать суммарный спин S двух тождественных бозонов со спином s в состоянии с относительным орбитальным моментом L (L — момент в с.ц.и.), т. е. какие состояния ${}^{2s+1}L$ возможны в системе из двух тождественных бозонов? Рассмотреть, в частности, случай бозонов со спином $s = 0$.

10.14. То же, что и в предыдущей задаче, но для тождественных фермионов. Специально рассмотреть случай фермионов со спином $1/2$.

10.15. Два тождественных бозона со спином $s = 0$ связаны потенциалом $U = k(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2/2$. Каков энергетический спектр системы?

10.16. Система состоит из трех тождественных частиц; $\mathbf{r}_{1,2,3}$ — радиусы-векторы частиц в системе центра инерции. Как ведет себя величина $\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2$ при перестановке местами 1-й и 3-й частиц? Симметризовать указанную величину по отношению к перестановке любых двух частиц системы.

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

§ 2. Основы формализма вторичного квантования

10.18. Найти коммутационное соотношение для операторов, представляющих эрмитову и антиэрмитову части бозевского оператора уничтожения \hat{a} (или рождения \hat{a}^+).

10.19. Построить из операторов координаты \hat{x} и импульса \hat{p} частицы операторы \hat{a} и \hat{a}^+ , обладающие свойствами бозевских операторов уничтожения и рождения.

Найти волновую функцию $\Psi_0(x)$ состояния частицы, которое в терминах фиктивных «частиц», операторами уничтожения и рождения которых являются введенные выше \hat{a} , \hat{a}^+ , является вакуумным.

10.20. Найти собственные функции и собственные значения операторов рождения и уничтожения. В рассматриваемых состояниях найти распределение по числу частиц.

Обсудить случаи бозевских и фермиевских операторов.

10.21. Исходя из антикоммутиционных соотношений для фермиевских операторов уничтожения \hat{b} и рождения \hat{b}^+ показать, что собственные значения оператора числа частиц $\hat{n} = \hat{b}^+ \hat{b}$ равны 0 и 1.

10.22. Является ли переход от операторов \hat{a} , \hat{a}^+ к новым операторам $\hat{a}' = \hat{a} + \alpha$, $\hat{a}'^+ = \hat{a}^+ + \alpha^*$ (α — комплексное число) унитарным преобразованием? Рассмотреть случаи фермиевских и бозевских операторов рождения и уничтожения.

Провести анализ состояния вакуума «новых» частиц $|0'\rangle$ (частиц, операторами уничтожения и рождения которых являются \hat{a}' , \hat{a}'^+) в терминах исходных частиц, т. е. найти распределение по числу этих частиц.

10.23. То же, что и в предыдущей задаче, для преобразования вида

$$\hat{a}' = \alpha \hat{a} + \beta \hat{a}^+, \quad \hat{a}'^+ = \alpha \hat{a}^+ + \beta \hat{a}$$

(α , β — вещественные числа; предварительно выяснить, при каких значениях α , β указанное преобразование является унитарным).

10.24. Можно ли для преобразования вида

$$\hat{a}' = \hat{a}^+, \quad \hat{a}'^+ = \hat{a}$$

рассматривать \hat{a}' , \hat{a}'^+ как операторы уничтожения и рождения некоторых новых частиц?

Провести анализ состояний $|n'\rangle$ (т. е. состояний с определенным значением n новых частиц) в терминах исходных частиц.

10.25. Пусть операторы $\hat{a}_{f_i}^+$ являются операторами рождения частицы в состоянии Ψ_{f_i} (f_i — совокупность квантовых чисел полного набора). Произвольное одночастичное состояние $|1\rangle$ можно представить в виде

$$|1\rangle = \sum_i C_{f_i} \hat{a}_{f_i}^+ |0\rangle.$$

Какой квантовомеханический смысл имеют коэффициенты C_{f_i} ?

Рассмотреть, в частности, одночастичное состояние бесспиновой частицы вида

$$|1\rangle = \int \varphi(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) d\mathbf{r} |0\rangle.$$

10.26. Операторы $\hat{a}_{f_i}^+$, \hat{a}_{f_i} и $\hat{a}_{g_k}^+$, \hat{a}_{g_k} являются операторами рождения и уничтожения частицы в состояниях, определяемых квантовыми числами f_i и g_k двух различных полных наборов.

Указать соотношения между этими операторами.

10.27. Двухчастичное состояние системы тождественных бозонов (или фермионов) описывается вектором состояния

$|2\rangle = \hat{a}_{f_1}^+ \hat{a}_{f_2}^+ |0\rangle$, где $\hat{a}_{f_i}^+$ — оператор рождения частицы в состоянии, определяемом квантовыми числами f_i некоторого полного набора.

Нормировать вектор состояния на единицу. Рассмотреть случаи одинаковых и различных квантовых чисел f_1 и f_2 . Указать вид нормированных волновых функций рассматриваемых состояний в координатном представлении (как для бозонов, так и для фермионов).

10.28. То же, что и в предыдущей задаче, для трехчастичного состояния $|3\rangle = \hat{a}_{f_1}^+ \hat{a}_{f_2}^+ \hat{a}_{f_3}^+ |0\rangle$. Для определенности ограничиться случаем, когда все три набора квантовых чисел f_1, f_2, f_3 различны.

10.29. Для системы тождественных частиц определенного сорта указать вид следующих операторов в пространстве чисел заполнения:

- гамильтониана \hat{H} , считая частицы свободными;
- суммарного импульса $\hat{\mathbf{P}}$;
- радиуса-вектора центра инерции $\hat{\mathbf{R}}_{ц. и.}$.

10.30. Используя результаты предыдущей задачи, найти оператор скорости центра инерции $\hat{\mathbf{V}}_{ц. и.}$ системы из N тождественных свободных частиц.

10.31. Для системы, состоящей из одинаковых частиц, найти в представлении чисел заполнения вид операторов плотности числа частиц $\hat{n}(\mathbf{r})$ (в точке \mathbf{r} пространства) и числа частиц $\hat{N}(v)$, находящихся в некотором объеме v .

10.32. Доказать соотношения

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\Psi}(\mathbf{r})]_- = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\Psi}^+(\mathbf{r})]_- = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}),$$

где $\hat{\mathbf{P}}, \hat{\Psi}(\mathbf{r})$ — операторы импульса и поля (Ψ -операторы) в представлении чисел заполнения для системы тождественных бозонов со спином $s = 0$.

Обобщить соотношения на случай бозонов с отличным от нуля спином и на случай фермионов.

10.33. Найти в представлении чисел заполнения вид оператора \hat{F}^2 квадрата аддитивной величины ($F = \sum_a f_a$).

Задачу предлагается решить двумя способами:

а) исходя из равенства $\hat{F}^2 = \hat{F}\hat{F}$ и используя известный вид одночастичного оператора (см. 10.29);

б) исходя из равенства

$$\left(\sum_a \hat{f}(\xi_a)\right)^2 = \sum_a \hat{f}^2(\xi_a) + \sum_{a \neq b} \hat{f}(\xi_a) \hat{f}(\xi_b)$$

и используя стандартный вид одно- и двухчастичных операторов в схеме вторичного квантования.

Сравнить полученные результаты.

10.34. Найти в представлении чисел заполнения оператор произведения плотностей числа частиц $n_1 n_2$ в различных точках пространства $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ ($\mathbf{r}_1 \neq \mathbf{r}_2$).

Отметим, что среднее значение $\overline{n_1 n_2}$ используется для описания пространственной корреляции флуктуаций плотности (см. 10.36 и 10.38).

§ 3. Системы из большого числа $N \gg 1$ частиц

10.35. В основном состоянии бозе-газа из N невзаимодействующих частиц со спином $s=0$, находящихся в объеме V , найти среднюю плотность числа частиц, среднее число частиц в некотором объеме v и флуктуацию этого числа частиц.

Задачу предлагается решить усреднением соответствующих операторов в представлении чисел заполнения.

10.36. В условиях предыдущей задачи рассмотреть пространственную корреляцию флуктуаций плотности числа частиц. Для однородной системы она характеризуется корреляционной функцией $v(r)$ ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$), равной

$$v(r) = \frac{1}{\bar{n}} \{ \overline{n_1 n_2} - \bar{n}^2 \} \quad (n_1 \equiv n(\mathbf{r}_1) \text{ и т. д.}),$$

где \bar{n} — средняя плотность числа частиц.

Сравнить с соответствующим результатом для системы из N классических не взаимодействующих друг с другом частиц, находящихся в объеме V .

10.37. В основном состоянии системы из N не взаимодействующих друг с другом фермионов, находящихся в объеме V (идеальный ферми-газ), найти среднюю плотность числа частиц и среднее число частиц в некотором объеме v .

Задачу предлагается решить усреднением соответствующих операторов в представлении чисел заполнения.

10.38. В условиях предыдущей задачи рассмотреть корреляцию плотностей числа частиц с определенными значениями проекции спина на ось z в различных точках пространства: найти $\overline{n(\mathbf{r}_1, s_{z1}) n(\mathbf{r}_2, s_{z2})}$ и сравнить с произведением $\overline{n(\mathbf{r}_1, s_{z1})} \times \overline{n(\mathbf{r}_2, s_{z2})}$. Рассмотреть случаи различных и одинаковых значений s_{z1} и s_{z2} .

Найти корреляционную функцию плотности (см. 10.36).

10.39. Рассматривая взаимодействие между частицами как возмущение, найти в первом порядке теории возмущений энергию основного состояния бозе-газа, содержащего N частиц со спином $s=0$ в объеме V (взаимодействие частиц друг с другом описывается короткодействующим парным потенциалом отталкивания $U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) \geq 0$).

10.40. То же, что и в предыдущей задаче, для ферми-газа частиц со спином $s=1/2$. Предполагается, что потенциал

парного взаимодействия не зависит от спина и удовлетворяет условию $k_F R_0 \ll 1$, где R_0 — радиус потенциала, $\hbar k_F$ — граничный импульс.

10.41. Идеальный ферми-газ нейтральных частиц со спином $s = 1/2$, имеющих спиновый магнитный момент μ_0 (так что $\hat{\mu} = \mu_0 \hat{\sigma}$), находится во внешнем однородном магнитном поле.

Для основного состояния рассматриваемой системы найти:

- а) числа заполнения одночастичных состояний;
- б) магнитную восприимчивость газа (в случае достаточно слабого поля).

Взаимодействие магнитных моментов друг с другом пренебрежимо мало.

Г л а в а 11

АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ

§ 1. Стационарные состояния атомов с одним и двумя электронами *)

11.1. Найти поправку к уровням энергии водородоподобного атома **) за счет релятивистской зависимости массы частицы (электрона) от скорости в первом порядке теории возмущений. Сравнить величину поправки со значениями энергетических уровней атома.

Для бесспиновой частицы полученный результат дает тонкую структуру уровней водородоподобного атома. В случае же электрона, как это следует из уравнения Дирака, кроме рассмотренной поправки в гамильтониане имеется еще одно слагаемое, описывающее так называемое спин-орбитальное взаимодействие, вклад которого в смещение уровней атома имеет такой же порядок величины, как и рассчитанная в данной задаче поправка.

11.2. Вычислить в первом приближении теории возмущений сдвиг энергетического уровня основного состояния водородоподобного атома, обусловленный неточечностью ядра. Ядро считать сферой радиуса R , по объему которой равномерно распределен заряд Ze . Оценить численное значение поправки и сравнить ее с релятивистскими эффектами (см. предыдущую задачу).

Насколько существенна неточечность ядра для μ -мезоатома?

11.3. Исследовать движение отрицательно заряженного μ -мезона (мюона) в поле ядра заряда Ze (рассматриваемого как

*) В задачах этой главы часто, специально не оговариваясь, мы используем *атомные единицы* (ат. ед.): $e = \hbar = m_e = 1$.

**) Водородоподобным (и аналогично гелиеподобным) атомом или ионом мы называем систему, состоящую из ядра с произвольным зарядом и одного (двух) электронов.

сфера радиуса R , однородно заряженная по объему; $R = 1,2A^{1/3} \cdot 10^{-13}$ см, $A \approx 2Z$, A — атомный номер ядра); взаимодействие мюона с ядром имеет чисто электростатический характер.

Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии мюона в предельных случаях малых и весьма больших значений Z . Оценить энергию γ -квантов, излучаемых при атомных переходах в нижней части энергетического спектра μ -мезоатома.

11.4. Рассмотреть сверхтонкую структуру уровней s -состояний водородоподобного атома, связанную с взаимодействием магнитных моментов электрона и ядра. Ядро имеет спин I и магнитный момент μ_0 , так что $\hat{\mu} = \frac{\mu_0}{I} \hat{I}$, и предполагается точечной частицей. Оценить величину сверхтонкого расщепления и сравнить ее с интервалами тонкой структуры (см. задачу 11.1; характерные значения магнитных моментов ядра имеют величину $e\hbar/m_p c$, m_p — масса протона, $I \sim 1$).

В случае атома водорода сравнить полученный результат с экспериментальным значением сверхтонкого расщепления (HFS) основного состояния $\Delta\nu_{\text{HFS}} \equiv \Delta E_{\text{HFS}}/2\pi\hbar = 1420$ МГц *); магнитный момент протона равен $\mu_p = 1,39e\hbar/m_p c$.

11.5. Рассчитать в первом порядке теории возмущений энергию основного состояния двухэлектронного атома (или иона), рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение. Получить значение потенциала ионизации системы и сравнить его с экспериментальными данными для атома гелия и ионов лития, бериллия, углерода: $I(\text{He}) = 24,5$ эВ; $I(\text{Li}^+) = 75,6$ эВ; $I(\text{Be}^{++}) = 153,6$ эВ; $I(\text{C}^{4+}) = 393$ эВ.

11.6. Рассчитать в первом порядке теории возмущений энергию основного состояния и потенциал ионизации двухэлектронного атома (или иона), выбрав невозмущенный гамильтониан в виде

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - Z_{\text{эфф}}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)$$

(использована атомная система единиц). Параметр $Z_{\text{эфф}}$ в этом гамильтониане выбрать из условия обращения в нуль поправки первого порядка к энергетическому уровню системы. Сравнить с результатом предыдущей задачи (см. также следующую задачу).

11.7. Найти энергию и потенциал ионизации основного состояния двухэлектронного иона, исходя из вариационного принципа. В качестве пробной функции взять произведение водородных функций с некоторым эффективным зарядом $Z_{\text{эфф}}$, играющим роль вариационного параметра. Сравнить с результатом

*) Энергия, соответствующая частоте $\nu = 1$ МГц, равна $\epsilon \approx 4,14 \cdot 10^{-9}$ эВ.

задачи 11.5 и с приведенными там экспериментальными данными.

Можно ли на основании полученного результата сделать вывод о существовании устойчивого иона водорода H^- ?

11.8. Найти среднюю энергию двухэлектронного иона с зарядом ядра Ze в состоянии, описываемом волновой функцией вида

$$\Psi(r_1, r_2) = C [\exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) + \exp(-\beta r_1 - \alpha r_2)].$$

Воспользовавшись полученным выражением и выбрав значения параметров $\alpha = 1$, $\beta = 0,25$, доказать существование стабильного иона водорода H^- .

11.9. Найти приближенно энергетические уровни дискретного спектра и соответствующие им волновые функции для системы, состоящей из ядра с зарядом Ze , электрона и μ^- -мезона.

11.10. Рассчитать сверхтонкое расщепление триплетного 2^3S -состояния атома гелия с ядром 3He (спин ядра $I = 1/2$, магнитный момент $\mu = -1,064e\hbar/m_p c$). При вычислениях использовать приближенный вид волновой функции 2^3S -состояния, получающийся в пренебрежении взаимодействием электронов друг с другом. Сравнить полученный результат с экспериментальным значением величины сверхтонкого расщепления $\Delta\nu_{HFS} \equiv \Delta E_{HFS}/2\pi\hbar \approx 6740$ МГц.

11.11. Какие значения может принимать момент относительного движения электронов в орто- и парасостояниях гелиеподобных атомов?

11.12. Найти уровни энергии и потенциалы ионизации возбужденных состояний гелиеподобных атомов в приближении, в котором взаимодействие между электронами эффективно учитывается как экранирование заряда ядра электроном, находящимся в основном, $1s$ -состоянии. Сравнить полученный результат с экспериментальными данными, приведенными в решении задачи.

11.13. Рассчитать энергетические уровни и потенциалы ионизации синглетного и триплетного $2S$ -состояний двухэлектронного атома (или иона), рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение.

Сравнить полученные результаты с экспериментальными данными для атома гелия: $I_{He}(2^3S) \approx 0,175$ ат. ед. $\approx 4,76$ эВ, $I_{He}(2^1S) \approx 0,146$ ат. ед. $\approx 3,97$ эВ — и иона лития Li^+ : $I_{Li^+}(2^3S) \approx 0,605$ ат. ед. $\approx 16,5$ эВ.

11.14. Найти энергию и потенциал ионизации 2^3S -состояния гелиеподобного атома вариационным методом. В качестве пробной функции взять должным образом симметризованное произведение водородных функций $1s$ - и $2s$ -состояний с некоторым эффективным зарядом ядра $Z_{эфф}$, играющим роль вариационного параметра.

В случае атома гелия и иона лития Li^+ сравнить полученный результат с экспериментальными данными (см. 11.13).

11.16. Показать, что у гелиеподобных атомов все устойчивые возбужденные состояния (т. е. стабильные относительно распада на соответствующий водородоподобный атом и свободный электрон) имеют электронную конфигурацию $1snl$, т. е. один из электронов обязательно находится в основном, $1s$ -состоянии.

11.16. Обобщить результат предыдущей задачи на случай литиеподобных атомов (три электрона в кулоновском поле ядра с зарядом Ze , $Z \geq 3$): показать, что устойчивыми являются только такие состояния системы, электронная конфигурация которых имеет вид $(1s)^2nl$, т. е. два электрона обязательно находятся в основном, $1s$ -состоянии.

11.17. Оценить значения потенциалов ионизации основного 2S - (электронная конфигурация $(1s)^22s$) и первого возбужденного 2P -состояний (электронная конфигурация $(1s)^22p$) литиеподобного атома, считая, что взаимодействие электронов, находящихся в основном состоянии, с «возбужденным» электроном сводится к экранировке на 2 величины заряда ядра.

В случае атома лития сравнить полученные значения с экспериментальными: $I(^2S) = 5,37$ эВ и $I(^2P) = 3,52$ эВ.

11.18. Рассчитать вариационным методом энергию основного состояния литиеподобного атома. Волновые функции электронов выбрать в виде соответствующих водородных функций с эффективным зарядом ядра $Z_{\text{эф}}$, играющим роль вариационного параметра.

Расчет провести двумя способами:

а) пренебрегая обменными эффектами;

б) взяв в качестве волновой функции должным образом симметризованное произведение одночастичных волновых функций.

В случае атома лития сравнить полученные результаты с экспериментальным значением $E_0 \approx -203,4$ эВ $\approx -7,48$ ат. ед.

§ 2. Многоэлектронные атомы

11.19. Найти возможные термы возбужденных состояний атома с электронной конфигурацией (сверх заполненных оболочек; $n \neq n'$):

а) $nsn'p$; б) $npr'p$; в) $npr'd$.

11.20. Найти возможные термы атома со следующей электронной конфигурацией (сверх заполненных оболочек):

а) $(np)^2$; б) $(np)^3$; в) $(np)^4$; г) $(nd)^2$.

Пользуясь правилом Гунда, указать нормальный терм атома.

11.21. Определить основные термы атомов N, Cl и ионов N^+ , Cl^+ .

11.22. Какова четность атомных термов, имеющих электронную конфигурацию (сверх заполненных оболочек):

а) $(ns)^k$; б) $(np)^k$; в) $(nd)^k$; г) $(np)^k(nd)^l$?

11.23. Указать атомные термы, возможные для электронной конфигурации $(nl)^2$.

11.24. Каковы мультиплетность $2S + 1$ и полный орбитальный момент L основного состояния атома с электронной конфигурацией $(nl)^k$ сверх заполненных оболочек?

11.25. Каково число различных независимых состояний (не термов!) атома, отвечающих электронной конфигурации $(nl)^k$ сверх заполненных оболочек?

11.26. Какое число различных независимых состояний атома, имеющего электронную конфигурацию $(nl)^3$, отвечает значению $S = 3/2$ суммарного спина электронов?

11.27. Возбужденным состояниям атома, имеющим электронную конфигурацию $nsn'l$ ($n \neq n'$), отвечают два терма: 1L и 3L (L — суммарный орбитальный момент, $L = l$). Рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение, показать, что энергия триплетного терма ниже энергии синглетного. Вид радиальных функций ns - и $n'l$ -электронов не конкретизировать.

11.28. Атом содержит сверх заполненных оболочек два эквивалентных np -электрона. Рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение, найти порядок расположения энергетических уровней возможных термов 1S , 1D , 3P атома. Убедиться в том, что значения квантовых чисел S и L нормального терма подтверждают правило Гунда.

Указание. При составлении правильных функций «нулевого» приближения, отвечающих определенному значению L момента, удобно использовать тензорный формализм (см. задачи § 4 главы 3). Явный вид радиальной зависимости волновых функций np -электронов не конкретизировать.

11.29. Используя выражение для электронной плотности нейтрального атома согласно модели Томаса — Ферми, найти зависимость от Z среднего расстояния электрона от ядра и среднего значения квадрата этой величины. Каково значение \bar{r}^2 для $n \geq 3$?

11.30. Найти распределение электронов по импульсам в нейтральном атоме с зарядом ядра Z согласно модели Томаса — Ферми. Учесть, что универсальная функция $\chi(x)$ этой модели, определяющая объемную плотность электронов, монотонно убывает с ростом x .

Используя полученный результат, найти зависимость от заряда ядра Z средних величин импульса и кинетической энергии электрона.

11.31. В рамках модели Томаса — Ферми для нейтрального атома найти зависимость от заряда ядра Z :

- а) характерной величины орбитального момента электрона;
- б) энергии полной ионизации атома.

11.32. Определить зависимость от Z числа электронов распределения Томаса — Ферми, находящихся в s -состоянии.

11.33. В модели Томаса — Ферми для нейтрального атома выразить через электронную плотность $n(r)$ кинетическую энергию электронов, энергию их взаимодействия друг с другом и с ядром.

Используя полученные выражения, теорему вириала и поведение на малых расстояниях $r \rightarrow 0$ электростатического потенциала самосогласованного поля электронов и ядра

$$\varphi(r) \approx \frac{Z}{r} - 1,80Z^{4/3},$$

получить численное значение энергии полной ионизации атома.

11.34. В приближении Томаса — Ферми получить выражение для полной энергии нейтрального атома через электронную плотность $n(r)$.

Рассматривая функционал $E[n(r)]$, показать, что нормированная функция $(\int n(r) dV = Z)$, минимизирующая этот функционал, является решением уравнения Томаса — Ферми.

Используя полученный результат, найти энергию полной ионизации атома вариационным методом, выбрав универсальную функцию $\chi(x)$ модели в виде $\chi_{\text{проб}}(x) = A \exp(-\alpha x)$, α — вариационный параметр. Сравнить полученное выражение для энергии ионизации и пробную функцию $\chi_{\text{проб}}(x)$ при малых x с известными результатами точного численного решения.

11.35. Используя экстремальные свойства функционала $E[n(r)]$, установленные в предыдущей задаче, доказать в рамках модели Томаса — Ферми:

а) теорему вириала; б) соотношение $U_{e \text{ яд}} = -7U_{ee}$ между энергиями взаимодействия электронов друг с другом U_{ee} и с ядром $U_{e \text{ яд}}$.

§ 3. Основные представления теории молекул

11.36. Произвести классификацию возможных термов молекулярного иона водорода H_2^{+*} . Указать, какие значения может принимать орбитальный момент электрона L (по отношению к центру симметрии иона) для различных термов иона.

11.37. Состояние системы из двух электронов описывается волновой функцией $\Psi = \chi_{\alpha\beta} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, где $\chi_{\alpha\beta}$ — спиновая функция, а функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ пространственных переменных имеет вид:

*) Отметим, что в задачах, связанных с классификацией термов молекул, речь идет об описании некоторых формальных свойств атомных систем при фиксированном положении ядер, так как при этом остается открытым вопрос об устойчивости такой системы по отношению к «развалу» ее на отдельные атомы (или ионы). В случае иона H_2^+ устойчивым является только одно, Σ_g^+ -состояние ($\Lambda = 0$).

- а) $\psi = f(r_1, r_2)$;
 б) $\psi = (\mathbf{r}_1 \mathbf{n}_0 + \mathbf{r}_2 \mathbf{n}_0) f(r_1, r_2)$;
 в) $\psi = ([\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2] \mathbf{n}_0) f(r_1, r_2)$;
 г) $\psi = (\mathbf{r}_1 \mathbf{n}_0 + \mathbf{r}_2 \mathbf{n}_0) ([\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2] \mathbf{n}_0) f(r_1, r_2)$
 (\mathbf{n}_0 — постоянный вектор).

Произвести принятую в теории двухатомных молекул классификацию указанных состояний.

11.38. Указать термы молекулярного иона водорода H_2^+ , которые могут получиться при соединении протона и атома водорода, находящегося в состоянии с главным квантовым числом $n = 2$.

11.39. Определить термы двухатомных молекул N_2 , LiH , HCl , NO , которые могут получиться при соединении соответствующих атомов, находящихся в основном состоянии.

11.40. Могут ли в результате адиабатического разведения ядер — протонов из термов молекулы водорода H_2 получиться два атома водорода, оба находящиеся в возбужденных состояниях?

11.41. Может ли в результате адиабатического разведения ядер из термов молекулы LiH получиться атом водорода, находящийся в возбужденном состоянии (напомним, что потенциал ионизации основного состояния атома лития равен $I = 0,20$ ат. ед.)?

11.42. Для двухатомной молекулы оценить, по порядку величины, отношение следующих величин:

- а) интервалов между электронными, колебательными и вращательными уровнями;
 б) межъядерного расстояния и амплитуды нулевых колебаний ядер;
 в) характерных периодов и скоростей электронных и ядерных движений.

11.43. Считая известными следующие характеристики молекулы водорода H_2 :

- а) энергию диссоциации основного состояния молекулы на два невозбужденных атома водорода $I_0 = 4,46$ эВ;
 б) частоту колебаний ω_e молекулы, $\hbar \omega_e = 0,54$ эВ;
 в) ротационную постоянную $B_e = 7,6 \cdot 10^{-3}$ эВ,

найти соответствующие величины для молекул HD и D_2 , т. е. молекул, в которых одно или оба ядра — протоны заменены на дейтрон.

Сравнить величины эффекта изотопического смещения уровней атома и молекулы водорода.

11.44. Каковы возможные вращательные состояния молекул водорода H_2 , дейтерия D_2 и HD , находящихся в основном, Σ_g^+ -состоянии, в зависимости от значения суммарного ядерного спина молекул ($s_d = 1$)?

11.45. Обсудить вопрос о возможности существования отличного от нуля среднего электрического дипольного момента двух-атомной системы в стационарных состояниях:

а) электронного терма, т. е. электронной подсистемы с фиксированным положением ядер;

б) молекулы.

Рассмотреть состояния с различными значениями Λ ($\Lambda = 0$ и $\Lambda \neq 0$) и случаи, когда ядра атомов являются:

а) тождественными; б) изотопами одного и того же элемента; в) различными.

11.46. Получить выражение для энергии $E_0(R)$ основного терма молекулярного иона водорода H_2^+ вариационным методом, аппроксимируя волновую функцию терма функцией вида

$$\Psi_{\text{проб}}(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi R^3}} e^{-\frac{\alpha r}{R}},$$

где r — расстояние электрона от центра отрезка, соединяющего ядра — протоны, α — вариационный параметр.

Выбрав в полученном выражении $E_0(R, \alpha)$ параметр $\alpha = 1,9$ (при таком значении α функция двух переменных $E_0(R, \alpha)$ имеет абсолютный минимум при некотором R_0 , подлежащем определению), найти размер иона R_0 (R_0 — расстояние между ядрами иона в положении равновесия), минимальную энергию терма E_0 и энергию нулевых колебаний ядер — протонов иона $E_{\text{кол. о.}}$. Сравнить полученные результаты с экспериментальными данными $R_0 \approx 2,0$ ат. ед., $E_0 \approx -0,60$ ат. ед., $E_{\text{кол. о.}} \approx 0,0044$ ат. ед.

Можно ли на основании решения данной задачи сделать вывод о существовании стабильного иона H_2^+ ?

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

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

Указание. При решении задачи удобно использовать тензорный формализм (см. 3.68). Состояния подобного типа реализуются в двухатомных молекулах, причем в роли «первой» частицы выступает электронная подсистема, а в роли «второй» — ядерная (правда, орбитальные моменты электронов и ядер в отдельности не имеют определенного значения).

11.48. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти спин-угловую зависимость волновых функций $\Psi_{J, J_z, \Lambda}$ состояний частицы с определенными значениями $J = 1/2$ суммарного момента частицы, его проекции $J_z = \pm 1/2$ на ось z и с определенной

проекцией λ ($\lambda = \pm 1/2$) спина частицы на направление ее радиуса-вектора. Каковы орбитальный момент частицы и четность таких состояний?

11.49. Найти уровни энергии и соответствующие волновые функции стационарных состояний асимметричного волчка с моментом $J = 1$ в $J_z J_z^2$ -представлении.

11.50. Главные моменты инерции асимметричного волчка удовлетворяют условиям $I_1 \sim I_2 \gg I_3$. Найти уровни энергии волчка в первом порядке теории возмущений. Каков характер энергетического спектра и, в частности, какова кратность вырождения уровней в этом приближении? В каком порядке теории возмущений происходит дальнейшее снятие вырождения уровней?

11.51. То же, что и в предыдущей задаче, в случае, когда главные моменты инерции удовлетворяют условию $|I_1 - I_2| \ll \ll I_1 \sim I_3$.

§ 4. Атомы и молекулы во внешних полях. Взаимодействие атомов и молекул

11.52. Как известно, поляризуемость β_0 основного состояния атома определяется выражением (предполагается $J = 0$)

$$\beta_0 = 2 \sum_k' \frac{|\langle k | \hat{d} \mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}}, \quad (1)$$

где

$$\hat{d}_i = -e \sum_a x_{ai}$$

— оператор дипольного момента атома (суммирование проводится по всем электронам); \mathbf{n}_0 — произвольный единичный вектор; сумма в выражении (1) берется по всем возбужденным состояниям системы (причем если состояния $|k\rangle$ относятся к непрерывному спектру, то под суммой следует понимать интеграл).

Показать, что поляризуемость β_0 удовлетворяет неравенству (очевидно, $\beta_0 > 0$)

$$\beta_0 < \frac{2}{3} \frac{e^2}{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}} \sum_{a,b} \langle 0 | \mathbf{r}_a \mathbf{r}_b | 0 \rangle,$$

где $E_1^{(0)}$ — энергия первого возбужденного состояния атома.

Получить также ограничение снизу на величину β_0 , взяв в сумме (1) лишь первое отличное от нуля слагаемое.

В случае атома водорода рассчитать указанные ограничения снизу и сверху на величину β_0 и сравнить с точным значением, равным $\beta_0 = 9/2$ ат. ед. $= 9a_0^3/2$, a_0 — боровский радиус.

11.53. Уточнить ограничения снизу и сверху на значение поляризуемости β_0 основного состояния атома водорода, полученные в предыдущей задаче, включив в рассмотрение еще одно слагаемое (возбужденное состояние) в сумме (1) (см. предыдущую задачу).

11.54. Рассчитать поляризуемость основного состояния атома водорода вариационным методом. При решении задачи воспользоваться пробными функциями вида:

$$\begin{aligned} \text{а) } \Psi_{\text{проб}} &= C\Psi_0(r)[1 + \alpha\mathcal{E}_0 r] \equiv C\Psi_0(r)[1 + \alpha r\mathcal{E}_0 \cos \theta]; \\ \text{б) } \Psi_{\text{проб}} &= C(\Psi_0 + \alpha\mathcal{E}_0\Psi_1), \end{aligned}$$

где

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \quad \Psi_1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \frac{r}{2\sqrt{6}a_0^2} e^{-r/2a_0}$$

— волновые функции основного ($n=1, l=0, m=0$) и первого возбужденного ($2, 1, 0$) состояний атома водорода в отсутствие внешнего электрического поля; ось z направлена вдоль поля, α — вариационный параметр. Сравнить полученные результаты с точным значением $\beta_0 = 9a_0^3/2$ (см. также следующую задачу).

11.55. Уточнить результат предыдущей задачи, используя пробные функции вида

$$\Psi_{\text{проб}} = C[\Psi_0 + \alpha\mathcal{E}_0\Psi_1] \equiv \frac{C}{\sqrt{\pi}} [e^{-r} + \alpha\mathcal{E}_0 \sqrt{\gamma^5} r \cos \theta e^{-\gamma r}],$$

где α, γ — вариационные параметры.

При получении численного значения поляризуемости $\beta_{\text{вар}}$ принять значение параметра $\gamma = 0,8$.

11.56. Рассмотреть эффект Штарка для возбужденных состояний атома водорода с главным квантовым числом $n=2$ в первом порядке теории возмущений. При решении задачи воспользоваться собственными функциями невозмущенного гамильтониана в сферических переменных Ψ_{nlm} . Указать условия применимости полученных результатов (при этом учесть то обстоятельство, что при решении задачи пренебрегается релятивистскими эффектами, приводящими к тонкой структуре уровня; интервал тонкой структуры для уровня с $n=2$ составляет $\Delta E_{FS} \approx 4,5 \cdot 10^{-5}$ эВ).

11.57. Используя известное значение $\beta_0 = \frac{9}{2} a_0^3 = \frac{9}{2}$ ат. ед. поляризуемости атома водорода в основном состоянии, получить приближенное значение поляризуемости основного состояния атома гелия:

а) полностью пренебрегая взаимодействием электронов друг с другом;

б) учитывая взаимодействие между электронами, результативно, как частичное экранирование заряда ядра (эффективный заряд ядра выбрать равным $Z_{\text{эфф}} = 27/16$, см. 11.7).

Рассчитать диэлектрическую проницаемость гелия при нормальных условиях и сравнить с экспериментальным значением $\epsilon_0 \approx 1,000070$ (такой величине ϵ_0 соответствует значение поляризуемости $\beta = 1,40$ ат. ед.).

11.58. Оценить порядок величины поляризуемости томас-фермиевской модели атома, т. е. отношение дипольного момента d «томас-фермиевских» электронов, возникающего под действием приложенного электрического поля, к величине напряженности поля \mathcal{E} .

Сравнить с вкладом в поляризуемость атома валентных электронов.

11.59. Для двухатомных молекул оценить порядок величины поляризуемости β основного состояния в случаях, когда:

- а) средний дипольный момент молекулы $\mathbf{d} = 0$ (в системе координат, жестко связанной с осью симметрии молекулы);
- б) $\mathbf{d} \neq 0$.

Считать, что основной терм молекулы $^1\Sigma$.

Сравнить полученные величины друг с другом и с характерной величиной поляризуемости атома.

11.60. Найти штарковское расщепление вращательных компонент электронного терма $^1\Sigma$ двухатомной молекулы, имеющей постоянный дипольный момент (штарковское расщепление предполагается малым по сравнению с расстоянием между соседними вращательными уровнями). Сравнить с результатом задачи 8.12.

11.61. Рассмотреть эффект Зеемана для водородоподобного мезоатома со спином мезона $s = 0$. Взаимодействие мезона с ядром (предполагаемым точечным) считать чисто электростатическим. Каков характер снятия вырождения уровней с главным квантовым числом n ?

11.62. То же, что и в предыдущей задаче, для атома водорода. Магнитное поле считать настолько сильным, что зеемановское расщепление много больше тонкой структуры уровней. Для уровня с $n = 2$ указать условия применимости полученных результатов (интервал тонкой структуры этого уровня составляет $\Delta E_{FS} \approx 4,5 \cdot 10^{-5}$ эВ).

11.63. Рассмотреть эффект Зеемана для триплетной и синглетной компонент сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода (ядро атома — протон), предполагая зеемановское расщепление малым по сравнению с величиной сверхтонкого расщепления.

11.64. Выяснить влияние конечности массы ядра на эффекты Штарка и Зеемана в водородоподобном атоме (или мезоатоме).

11.65. Найти зеемановское расщепление уровней позитрония (связанное состояние электрона и позитрона), предполагая его много большим тонкой структуры. Сравнить со случаем атома водорода.

11.66. Найти магнитную восприимчивость $\chi_{ат}$ атома гелия в основном состоянии, используя приближенный вид волновой функции, установленный в 11.7. Рассчитать магнитную восприимчивость 1 см³ газа из атомов гелия $\chi_{газ}$ при нормальных условиях и сравнить ее с экспериментальным значением, равным $-8,6 \cdot 10^{-11}$.

11.67. В случае триплетного 2^3P -состояния атома гелия возможны следующие термы: 3P_0 , 3P_1 , 3P_2 , которые при учете релятивистских эффектов имеют различные энергии (тонкая структура). Оценить магнитную восприимчивость атома в 3P_0 -состоянии и сравнить ее с магнитной восприимчивостью и поляризуемостью основного состояния атома.

11.68. Найти зеемановское расщепление вращательных компонент электронного термина $^1\Sigma$ двухатомной молекулы (зеемановское расщепление предполагается малым по сравнению с расстоянием между соседними вращательными уровнями).

11.69. Найти энергию взаимодействия заряженной частицы (протона, мезона, электрона и т. д.) с невозбужденным атомом водорода на больших расстояниях друг от друга.

11.70. Рассмотрим систему, состоящую из двух заряженных частиц и нейтрального атома водорода, находящегося в основном состоянии, причем расстояние между атомом и заряженными частицами много больше боровского радиуса. Найти энергию взаимодействия указанной системы. Имеет ли она аддитивный характер?

11.71. Найти энергию взаимодействия заряженной частицы и двухатомной молекулы, находящихся на большом расстоянии друг от друга. Предполагается, что молекула обладает постоянным дипольным моментом \mathbf{d} (в системе координат, жестко связанной с осью молекулы) и находится в основном состоянии по всем квантовым числам. Электронный терм молекулы $^1\Sigma$.

11.72. Найти энергию взаимодействия двух атомов водорода, находящихся в основном состоянии на большом расстоянии R друг от друга, вариационным методом. При расчетах использовать пробные функции вида:

$$а) \Psi_{проб} = C\Psi_0(r_1)\Psi_0(r_2) [1 + \alpha z_1 z_2];$$

$$б) \Psi_{проб} = C\Psi_0(r_1)\Psi_0(r_2) [1 + \alpha(x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2)],$$

где $\Psi_0(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$ — волновая функция основного состояния атома водорода; \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 — радиусы-векторы электронов первого и второго атомов относительно своих ядер, ось z направлена вдоль оси, проходящей через ядра; α — вариационный параметр.

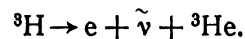
В принятых обозначениях оператор взаимодействия между атомами в диполь-дипольном приближении имеет вид

$$\hat{V} = \frac{\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 R^2 - 3(\mathbf{R} \mathbf{d}_1)(\mathbf{R} \mathbf{d}_2)}{R^5} = - \frac{e^2(2z_1 z_2 - x_1 x_2 - y_1 y_2)}{R^3}.$$

11.73. Найти энергию взаимодействия на больших расстояниях двух молекул, обладающих постоянными дипольными моментами \mathbf{d}_1 и \mathbf{d}_2 . Предполагается, что молекулы находятся в основных состояниях по всем квантовым числам; электронные термы молекул ${}^1\Sigma$.

§ 5. Нестационарные явления в атомах и молекулах

11.74. Атом водорода находится в основном состоянии. Ядром атома является тритон — сверхтяжелый изотоп водорода. В результате β -распада тритий превращается в гелий:



Найти вероятность того, что ион гелия, образующийся в результате распада, окажется в основном состоянии.

При расчете явления учесть то обстоятельство, что эффект изменения заряда ядра является доминирующим по сравнению с эффектами отдачи ядра (см. по этому поводу 11.77 и 11.78) и взаимодействия электрона β -распада и атомного электрона (скорость β -распадного электрона много больше скорости атомного: $v \geq 10v_{\text{ат}}$).

11.75. В условиях предыдущей задачи найти вероятности возбуждения различных состояний иона гелия (водородоподобный атом с $Z=2$) с главным квантовым числом $n=2$.

11.76. В условиях задачи 11.74 найти среднее значение энергии, приобретаемой атомным электроном в результате β -распада ядра.

11.77. Ядро атома, находящегося в стационарном состоянии Ψ_0 , испытывает внезапный толчок длительности τ , в результате которого приобретает скорость v (например, за счет отдачи при излучении γ -кванта возбужденным ядром).

Предполагая выполненными неравенства $\tau \ll T$ и $\tau \ll a/v$, где T и a — порядки величин электронных периодов и размеров электронной оболочки соответственно, выразить в общем виде вероятность перехода атома в состояние Ψ_n в результате такого «встряхивания».

11.78. Используя результат предыдущей задачи, вычислить суммарную вероятность возбуждения и ионизации атома водорода (первоначально находящегося в основном состоянии) в результате внезапного «встряхивания», при котором ядру — протону сообщается импульс P .

Указать условия применимости результата.

11.79. Обобщить результат 11.77 на случай двухатомной молекулы, т. е. получить общее выражение для вероятности пере-

хода молекулы из стационарного состояния Ψ_0 в состояние Ψ_n в результате внезапного «встряхивания», при котором одному из ядер молекулы сообщается импульс P .

11.80. В условиях предыдущей задачи найти вероятность того, что молекула останется в исходном состоянии, если внезапное изменение скорости ядра V много меньше характерных скоростей электронов в молекуле. Электронный терм молекулы $^1\Sigma$, и она находится в основном состоянии по всем квантовым числам ($v = K = 0$).

11.81. На атом водорода, находящийся при $t = 0$ в нормальном состоянии, действует однородное, периодическое во времени (зависимость от времени вида $\sin \omega t$) электрическое поле.

Пользуясь теорией возмущений, вычислить отнесенную к единице времени вероятность ионизации атома. Электрон в конечном состоянии считать, для простоты, свободным.

11.82. Найти вероятность выбрасывания K -электрона из атома при дипольном переходе ядра в результате прямого электростатического взаимодействия электрона с протонами ядра (внутренняя конверсия в пренебрежении запаздыванием).

В качестве начальной волновой функции использовать Ψ -функцию K -электрона водородоподобного атома. Скорость электрона в конечном состоянии считать много больше атомной.

11.83. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае, когда начальное и конечное состояния ядра имеют равный нулю момент (такие процессы называют конверсией при монополярном, или $E0$ -переходе).

11.84. Найти вероятность выбрасывания K -электрона из возбужденного состояния μ -мезоатома (атом содержит один μ^- -мезон, находящийся на возбужденном уровне) в результате эффекта Оже (т. е. μ -мезон переходит в более низкое энергетическое состояние, а энергия перехода передается атомному электрону в результате электростатического взаимодействия мюона и электрона).

Ограничиться рассмотрением так называемого дипольного, или P -перехода Оже, при котором изменение орбитального момента мюона $|\Delta l| = 1$.

При проведении расчетов считать размеры мюонной орбиты много меньше электронных и электрон в конечном состоянии свободным.

Указать условия применимости полученного результата. Рассмотреть, в частности, мюонный переход $2p \rightarrow 1s$.

11.85. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае $\Delta l = 0$ (S -переходы Оже). Для простоты ограничиться случаем, когда орбитальный момент электрона в начальном и конечном состояниях равен нулю.

Рассмотреть, в частности, мюонный переход $2s \rightarrow 1s$.

Глава 12

АТОМНОЕ ЯДРО

§ 1. Основные представления о ядерных силах.

Дейтрон

12.1. Как известно, ядерные силы характеризуются малым радиусом и большой интенсивностью. Так, качественные закономерности низкоэнергетического нуклон-нуклонного взаимодействия можно объяснить, только предположив, что радиус сил $R_0 \approx 2 \cdot 10^{-13}$ см (на больших расстояниях ядерные силы очень быстро убывают), при этом характерная величина потенциала ядерных сил составляет $U_0 \approx 40$ МэВ.

Найти характерные значения потенциалов кулоновского взаимодействия двух протонов и магнитного взаимодействия спиновых магнитных моментов двух нуклонов на указанном расстоянии R_0 и сравнить их с величиной U_0 .

12.2. Каким был бы магнитный момент дейтрона, если бы дейтрон находился в состоянии *):

а) 1S_0 ; б) 3S_1 ; в) 1P_1 ; г) 3P_0 ; д) 3P_1 ; е) 3D_1 ?

Напомним, что магнитные моменты свободных протона и нейтрона (в ядерных магнетонах) равны: $\mu_p = 2,79$; $\mu_n = -1,91$; экспериментальное значение магнитного момента дейтрона $\mu_d = 0,85$, а его спин $J_d = 1$.

Указание. Воспользоваться результатом задачи 3.54.

12.3. Для дейтрона оценить среднее значение $\overline{r^{-k}}$ ($r = r_p - r_n$), исходя из условия слабой связанности протона и нейтрона и имея в виду, что с подавляющей вероятностью дейтрон находится в состоянии 3S .

12.4. Каким был бы квадрупольный момент дейтрона, если бы дейтрон находился в состоянии:

а) 1S_0 ; б) 3S_1 ; в) 1P_1 ; г) 3P_0 ?

Выразить квадрупольный момент дейтрона через среднее квадратичное расстояние $\overline{r^2}$; сравнить с результатом следующей задачи.

12.5. То же, что и в предыдущей задаче, в предположении 3P_1 -состояния дейтрона.

Произвести численную оценку Q_0 ; сравнить с результатом предыдущей задачи и с экспериментальным значением квадрупольного момента дейтрона $Q_d = 2,82 \cdot 10^{-27}$ см².

*) Поскольку квантовые числа дейтрона твердо установлены, то задачи такого типа, в которых рассматриваются *гипотетические* состояния дейтрона, могут показаться искусственными. Однако следует иметь в виду, что именно сравнение предсказаний физических характеристик дейтрона, рассчитанных в различных предположениях о его квантовых числах, с экспериментальными данными и позволило в конечном счете идентифицировать состояние *реального* дейтрона.

12.6. Каковы собственные функции и собственные значения изотопического спина (его величины и проекции T_3) для системы из двух нуклонов?

12.7. Каково значение изотопического спина системы, состоящей из протона и нейтрона, в состоянии системы с определенными значениями суммарного спина S и момента относительного движения L нуклонов?

Указать изотопическую часть волновой функции дейтрона.

12.8. Указать наиболее общий вид изотопически-инвариантного оператора взаимодействия двух нуклонов.

Выразить найденный оператор O через операторы нуклон-нуклонного взаимодействия в состояниях с определенным значением изотопического спина $O_{T=0, 1}$.

12.9. Для двухнуклонной системы указать изотопическую структуру оператора кулоновского взаимодействия нуклонов.

12.10. На основании изотопической инвариантности ядерных сил и экспериментального факта существования единственного связанного состояния системы «протон + нейтрон» — дейтрона — показать, что не должно существовать связанных состояний системы из двух протонов или двух нейтронов.

Учесть значения квантовых чисел дейтрона: спин $J_d = 1$, четность $P_d = +1$.

12.11. От каких свойств инвариантности реальных ядерных сил пришлось бы отказаться, если бы состояние дейтрона представляло суперпозицию $^1P_1 + ^3P_1$ (а не $^3S_1 + ^3D_1$, как у реального дейтрона)?

Указать возможный вид взаимодействия, которое могло бы привести к указанному состоянию.

12.12. Предположив, что взаимодействие двух нуклонов имеет следующую изотопическую структуру:

$$\hat{U} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 \hat{\tau}_3^{(1)} \hat{\tau}_3^{(2)},$$

где $\hat{V}_{1, 2}$ — операторы, уже не зависящие от изоспиновых переменных (они — операторы в пространстве координат и спинов, симметричные по отношению к перестановке нуклонов), найти вид взаимодействия в системе из:

а) двух протонов; б) двух нейтронов; в) протона и нейтрона.

Согласуется ли рассматриваемое взаимодействие с:

1) изотопической инвариантностью; 2) зарядовой симметрией реальных ядерных сил?

12.13. Какие свойства дейтрона указывают на зависимость протон-нейтронного взаимодействия от спинов нуклонов?

Рассмотрев зависящие от спина потенциалы:

а) $O = V(r) \hat{\sigma}_p \hat{\sigma}_n = V(r) (2\hat{S}^2 - 3)$;

б) $O = V(r) \hat{S} \hat{L}$ (спин-орбитальное взаимодействие);

в) $O = V(r) [6(\hat{S}n)^2 - 2\hat{S}^2]$ (тензорные силы)

($\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n$, $\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_p + \hat{\sigma}_n)$ — оператор суммарного спина нуклонов), выяснить, какие из них могут быть использованы для объяснения сбсуждавшихся выше свойств дейтрона. Указать интегралы движения для рассматриваемых потенциалов.

12.14. Показать, что потенциал тензорных сил

$$\hat{U}_T = V(r) [6(\hat{\mathbf{S}}\mathbf{n})^2 - 2\hat{\mathbf{S}}^2]$$

($\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)$ — оператор суммарного спина нуклонов), рассматриваемый как возмущение центрально симметричного потенциала $U_0(r)$, приводит к сдвигу уровня S -состояния лишь во втором порядке теории возмущений.

12.15. Показать, что при учете тензорных сил, когда $\hat{U} = U_0(r) + \hat{U}_T$, где $\hat{U}_T = V(r) \hat{S}_{12}$, $\hat{S}_{12} \equiv 6(\hat{\mathbf{S}}\mathbf{n})^2 - 2\hat{\mathbf{S}}^2$, волновая функция дейтрона, представляющая суперпозицию ${}^3S_1 + {}^3D_1$, может быть записана в виде

$$\Psi = [f_0(r) + f_1(r) \hat{S}_{12}] \chi.$$

Здесь $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_p + \hat{\mathbf{s}}_n$ — оператор суммарного спина нуклонов, $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ — произвольная спиновая функция спина $S = 1$ в S_z -представлении (соответственно оператор $\hat{\mathbf{S}}$ и волновая функция Ψ , отвечающая суммарному спину нуклонов $S = 1$, также определены в S_z -представлении).

При каком выборе спиновой функции χ рассматриваемая волновая функция Ψ описывает состояние дейтрона с определенным значением J_z ?

Найти в рассматриваемом состоянии $\langle \mathbf{J} \rangle$.

12.16. Как известно, магнитный момент дейтрона, представляющего суперпозицию ${}^3S_1 + {}^3D_1$, равен

$$\mu_d = (1 - w)\mu({}^3S_1) + w\mu({}^3D_1) \approx 0,85 \text{ яд. маг.},$$

где $\mu({}^3S_1)$ и $\mu({}^3D_1)$ — магнитные моменты системы «протон + нейтрон» в состояниях 3S_1 , 3D_1 (см. 12.2), $w \approx 0,04$ — вероятность нахождения дейтрона в 3D_1 -состоянии.

Объяснить, почему для квадрупольного момента дейтрона нет соотношения, аналогичного приведенному выше для магнитного момента. В связи с этим отметим, что квадрупольный момент 3S_1 -состояния равен нулю, в состоянии 3D_1 он отрицателен, $Q({}^3D_1) < 0$, а его экспериментальное значение для дейтрона $Q_d \approx 2,82 \cdot 10^{-27} \text{ см}^2 > 0$.

12.17. Оценить размеры «зеркальных» ядер трития ${}^3\text{H}$ и гелия ${}^3\text{He}$, исходя из того, что при β -распаде ${}^3\text{H} \rightarrow {}^3\text{He} + e + \bar{\nu}$ максимальная кинетическая энергия электрона $\epsilon_0 = 17 \text{ кэВ}$.

Учесть изотопическую инвариантность ядерных сил и отсутствие у рассматриваемых ядер возбужденных состояний. Напомним следующие численные значения: $(M_n - M_p)c^2 \approx 1,29$ МэВ, $m_e c^2 \approx 0,51$ МэВ.

12.18. Как известно, размеры ядер определяются соотношением $R = r_0 A^{1/3}$, где A — число нуклонов в ядре.

Оценить значение r_0 из данных о β^+ -распаде ядра, содержащего $Z + 1$ протонов и Z нейтронов (так что $A = 2Z + 1$), выразив его через максимальное значение энергии ϵ_0 позитронов распада. Считать, что распадающееся ядро и ядро — продукт распада (являющиеся зеркальными ядрами) находятся в одинаковых состояниях (т. е. имеют одинаковые квантовые числа, за исключением значений T_3 -компонент изоспина). Энергию кулоновского взаимодействия протонов в ядре считать равной электростатической энергии равномерно заряженного шара, имеющего такие же заряд и радиус, как и ядро.

Получить численную оценку r_0 из распада ${}^{27}_{14}\text{Si} \rightarrow {}^{27}_{13}\text{Al} + e^+ + \nu$, для которого $\epsilon_0 = 3,48$ МэВ.

12.19. То же, что и в предыдущей задаче, из распада ${}^{34}_{17}\text{Cl} \rightarrow {}^{34}_{16}\text{S} + e^+ + \nu$, для которого $\epsilon_0 = 5,52$ МэВ.

§ 2. Модель оболочек

12.20. В модели оболочек каждый нуклон в ядре рассматривается как движущийся в некотором среднем (самосогласованном) поле, создаваемом остальными нуклонами ядра и являющемся сферически симметричным.

Предполагая, что самосогласованный потенциал можно аппроксимировать потенциалом

$$U(r) = -U_0 + \frac{1}{2}kr^2,$$

найти одночастичные энергетические уровни.

К каким значениям магических чисел приводит такая модель самосогласованного потенциала?

Какие качественные изменения в картине одночастичных уровней происходят при малом (но сферически симметричном) возмущении $\delta U(r)$ рассматриваемого потенциала?

Каковы предсказания модели в отношении моментов и четностей основных состояний ядер?

12.21. Как известно, объяснение свойств основных и нижних возбужденных состояний ядер на основе оболочечной модели может быть получено лишь при введении, наряду с центральным самосогласованным потенциалом $U(r)$, также спин-орбитального взаимодействия \hat{U}_{ls} .

В рамках модели, в которой

$$U(r) = -U_0 + \frac{1}{2}kr^2, \quad \hat{U}_{ls} = -\alpha \hat{l} \hat{\sigma} \quad (\alpha > 0)$$

(сравнить с предыдущей задачей), найти одночастичный энергетический спектр. Для $\alpha \approx \hbar\omega/10$ ($\omega = \sqrt{k/M}$) нарисовать картину нижних одночастичных уровней (такая модель правильно передает порядок расположения одночастичных уровней, существенный для описания свойств не слишком тяжелых ядер).

В рамках рассматриваемой модели найти моменты (спины) и четности основных состояний ядер: ${}^6\text{He}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^{10}\text{B}$, ${}^{12}\text{C}$, ${}^{13}\text{C}$, ${}^{13}\text{N}$, ${}^{14}\text{C}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{17}\text{O}$, ${}^{27}\text{Al}$, ${}^{40}\text{Ca}$.

12.22. Найти нижние одночастичные уровни для осцилляторного потенциала при наличии спин-орбитального взаимодействия вида

$$\hat{U}_{ls} = -\alpha r^2 \hat{l} \hat{\sigma}.$$

Обсудить характер расщепления уровней невозмущенного гамильтониана. Сравнить с результатом предыдущей задачи.

12.23. В рамках модели оболочек найти спин-изоспиновую часть волновых функций основных состояний ядер трития ${}^3\text{H}$ и гелия ${}^3\text{He}$.

12.24. Указать возможные значения полного момента J и изотопического спина T ядер, содержащих сверх заполненных оболочек два нуклона в состоянии $p_{1/2}$ (с одинаковым n). Ядрами, имеющими такую конфигурацию, являются ${}^{14}\text{C}$, ${}^{14}\text{N}$, ${}^{14}\text{O}$ (два нуклона сверх заполненных оболочек $(1s_{1/2})^4(1p_{3/2})^8$).

12.25. То же, что и в предыдущей задаче, для двух нуклонов в состоянии $p_{3/2}$.

12.26. В модели оболочек найти магнитный момент и гиромагнитный множитель для ядра, содержащего сверх заполненных оболочек лишь один нуклон (или имеющего одну дырку в незаполненной оболочке).

.Применить полученный результат к основным состояниям следующих ядер*): ${}^3\text{H}$ ($J=1/2$; $\mu=2,91$); ${}^3\text{He}$ ($1/2$; $-2,13$); ${}^{11}\text{B}$ ($3/2$; $2,69$); ${}^{13}\text{C}$ ($1/2$; $0,70$); ${}^{15}\text{N}$ ($1/2$; $-0,28$); ${}^{17}\text{O}$ ($5/2$; $-1,89$); ${}^{29}\text{Si}$ ($1/2$; $-0,55$).

При решении задачи воспользоваться схемой одночастичных уровней, установленной в 12.21.

12.27. То же, что и в предыдущей задаче, но для ядра, содержащего сверх заполненных оболочек по одному протону и нейтрону (или имеющего по одной протонной и нейтронной дырке в незаполненных оболочках) в одинаковых состояниях (т. е. с одинаковыми значениями n, l, j).

Расчет провести для различных значений момента (спина) ядра, возможных при данной нуклонной конфигурации. Сравнить с экспериментальными данными для ядер*): ${}^2\text{H}$ ($J=1$; $\mu=0,85$); ${}^6\text{Li}$ (1 ; $0,82$); ${}^{10}\text{B}$ (3 ; $1,80$); ${}^{14}\text{N}$ (1 ; $0,40$).

*) В скобках указаны экспериментальные значения спина J и магнитного момента μ ядра.

12.28. Рассчитать магнитный момент ядра, содержащего сверх заполненных оболочек по одному протону и нейтрону (или имеющего по одной протонной и нейтронной дырке в незаполненных оболочках) в одинаковых состояниях в условиях LS -связи (при этом одночастичные уровни характеризуются квантовыми числами n, l , а не n, l, j , как в схеме jj -связи).

Применить полученный результат к основному состоянию ядра ${}^6\text{Li}$, имеющему спин $J = 1$. Найти μ для различных возможных значений L и S и сравнить с экспериментальным значением $\mu_{\text{эксп}} = 0,82$ и результатом предыдущей задачи. Нуклоны сверх заполненной оболочки $(1s)^4$ находятся в $1p$ -состоянии (т. е. имеют $l = 1$).

Каков изотопический спин рассматриваемых состояний ядра ${}^6\text{Li}$?

12.29. Найти в схеме jj -связи магнитный момент ядра, имеющего одинаковое число протонов и нейтронов сверх заполненных оболочек в одинаковых состояниях nlj .

Применить полученный результат к ядру ${}^{22}_{11}\text{Na}$, имеющему спин $J = 3$ и магнитный момент $\mu_{\text{эксп}} = 1,75$.

12.30. То же, что и в предыдущей задаче, но в условиях LS -связи (см. 12.28).

12.31. В рамках модели оболочек найти соотношение между магнитными моментами основных состояний зеркальных ядер. Ограничиться рассмотрением ядер, у которых все нуклоны (обоих зарядовых состояний) сверх заполненных оболочек находятся в одинаковых состояниях nlj .

Применить полученный результат к ядрам ${}^3\text{H}$ и ${}^3\text{He}$ и сравнить его с данными эксперимента, учитывая, что $\mu_{\text{эксп}}({}^3\text{H}) = 2,91$; $\mu_{\text{эксп}}({}^3\text{He}) = -2,13$.

12.32. Найти квадрупольный момент ядра, имеющего сверх заполненных оболочек лишь один протон в состоянии:

а) $s_{1/2}$; б) $p_{3/2}$; в) $a_{5/2}$.

Выразить Q_0 через $\overline{r_p^2}$.

Каков квадрупольный момент ядра, имеющего лишь одну протонную дырку в указанных оболочках?

12.33. Обобщить результат предыдущей задачи на случай протона в состоянии с произвольным значением l и $j = l + 1/2$.

12.34. Найти квадрупольный момент ядра, имеющего сверх заполненных оболочек лишь один протон в состоянии с произвольным значением l и $j = l - 1/2$.

Сравнить с результатами предыдущих двух задач.

12.35. Найти квадрупольный момент ядра, имеющего сверх заполненных оболочек лишь один нейтрон в состоянии с орбитальным моментом l и полным моментом $j = l \pm 1/2$.

Указание. Ядро рассматривать как систему, состоящую из двух подсистем: нейтрона сверх заполненных оболочек и

нуклонов заполненных оболочек (как целого), движущихся относительно центра масс ядра *).

12.36. Как известно, модель оболочек с самосогласованным потенциалом осцилляторного вида

$$U(r) = -U_0 + \frac{1}{2}kr^2$$

позволяет понять и объяснить (при учете спин-орбитального взаимодействия) многие свойства не слишком тяжелых ядер.

Предполагая, что осцилляторный характер самосогласованного потенциала сохраняется и для тяжелых ядер $A \gg 1$, на основе квазиклассических соображений получить выражение для плотности нуклонов в таких ядрах. При решении задачи пренебречь кулоновским взаимодействием протонов и рассмотреть ядра с одинаковым числом протонов и нейтронов.

Согласуется ли полученное выражение с экспериментальными данными?

12.37. То же, что и в предыдущей задаче, для самосогласованного потенциала вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ \infty, & r > R. \end{cases}$$

Выбрав в соответствии с экспериментальными данными параметр R модели в виде $R = r_0 A^{1/3}$ (R — радиус ядра, $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13}$ см), найти граничный импульс p_F нуклонов в ядре. Какова при этом максимальная скорость нуклонов?

Г л а в а 13

ТЕОРИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ

§ 1. Борновское приближение

13.1. Показать, что амплитуда рассеяния частицы в произвольном внешнем поле может быть выражена через волновую функцию в области действия потенциала:

$$f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{im}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}) dV,$$

где \mathbf{k}_0, \mathbf{k} — волновые векторы частицы до и после рассеяния, $\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ — волновая функция, имеющая при $r \rightarrow \infty$ асимптотическое поведение вида

$$\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} + \frac{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})}{r} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}.$$

*) Обсуждение трудности модели оболочек, связанной с фиксированием центра масс ядра, рассматриваемого как система независимых частиц, см. в книге [3].

13.2. Как должен убывать потенциал взаимодействия на больших расстояниях $r \rightarrow \infty$, чтобы асимптотика волновой функции $\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}$ при $r \rightarrow \infty$ имела вид, указанный в предыдущей задаче, т. е. чтобы на больших расстояниях плоская волна не искажалась внешним полем? Ограничиться потенциалами, имеющими при $r \rightarrow \infty$ степенное убывание $U(r) \propto r^{-n}$.

13.3. Выяснить, на каких расстояниях от силового центра волновая функция $\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r})$ может быть представлена в асимптотическом виде, приведенном в 13.1. Считать, что при $r \gg R$ потенциал пренебрежимо мал (R — «радиус» потенциала).

13.4. Найти в борновском приближении амплитуду рассеяния и полное сечение рассеяния частиц в полях $U(r)$, указанных ниже. Исследовать предельные случаи малых и больших энергий частиц. Указать условия применимости рассмотрения.

$$a) U(r) = \alpha \delta(r - R); \quad б) U(r) = U_0 e^{-r/R}; \quad в) U(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-r/R};$$

$$г) U(r) = \alpha/r^2; \quad д) U(r) = \begin{cases} U_0, & r < R, \\ 0, & r > R; \end{cases} \quad е) U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}.$$

13.5. Для потенциалов $U(r)$, рассмотренных в предыдущей задаче (13.4, а, б), найти значение $\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(0)$ в первом порядке теории возмущений ($\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ — волновая функция, описывающая процесс рассеяния частиц с импульсом $\hbar \mathbf{k}$).

13.6. Показать, что в условиях применимости борновского приближения полное сечение рассеяния частиц $\sigma(E)$ в произвольном центральном поле $U(r)$ как функция энергии удовлетворяет неравенству

$$\frac{d}{dE} [E\sigma(E)] \geq 0,$$

т. е. $E\sigma(E)$ — монотонно растущая функция энергии E .

13.7. Показать, что при рассеянии частиц в поле притяжения (т. е. при $U(\mathbf{r}) \leq 0$) или в поле отталкивания ($U(\mathbf{r}) \geq 0$) в условиях применимости борновского приближения максимальное значение сечения рассеяния $\sigma(E)$ имеют частицы с энергией $E = 0$.

13.8. Получить выражение для амплитуды рассеяния частиц в борновском приближении в случае потенциала, имеющего обменный характер, т. е. $U_{\text{обм}}(\mathbf{r}) \equiv U(r)\Psi(-\mathbf{r})$.

Как амплитуда рассеяния в этом случае связана с амплитудой рассеяния в обычном поле $U(r)$? Каково различие в характере рассеяния быстрых частиц на «обычном» и «обменном» потенциалах?

13.9. Показать, что при больших энергиях частицы $kR \gg 1$ (R — радиус взаимодействия) полное сечение рассеяния в поле $U(\mathbf{r}) \equiv U(\rho, z)$ в борновском приближении может быть

представлено в виде

$$\sigma(E) \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{m}{2\hbar^2 E} \iint_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} U(\boldsymbol{\rho}, z) dz \right]^2 d^2\rho.$$

Импульс частиц до рассеяния направлен вдоль оси z ; $\boldsymbol{\rho}$ — двумерный радиус-вектор в плоскости, перпендикулярной оси z .

Применить указанную формулу к случаю поля $U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}$ и сравнить с результатом задачи 13.4, е.

13.10. В борновском приближении амплитуда рассеяния частиц вперед (на угол $\theta = 0$) является вещественной величиной ($\text{Im } f(\theta = 0) = 0$) и, таким образом, не удовлетворяет оптической теореме, согласно которой $\sigma(E) = 4\pi \text{Im } f(E, \theta = 0)/k$.

Объяснить, почему такой результат является естественным и нарушение оптической теоремы не противоречит успешному описанию дифференциального и полного сечений рассеяния в рамках борновского приближения (естественно, в условиях его применимости; см. также следующую задачу).

13.11. Написать выражение для амплитуды рассеяния во втором порядке теории возмущений. Найти $\text{Im } f^{(2)}(\theta = 0)$ и объяснить полученный результат.

13.12. При исследовании амплитуд процессов столкновения частиц важной характеристикой процесса является величина

$$\eta(E) = \text{Re } f(E, \theta = 0) / \text{Im } f(E, \theta = 0)$$

— отношение вещественной части амплитуды рассеяния на угол «нуль» к мнимой.

Выразить $|\eta(E)|$ через полное сечение рассеяния и дифференциальное сечение рассеяния частиц вперед. Как ведет себя величина $\eta(E)$ в условиях применимости борновского приближения?

13.13. Выразить в борновском приближении амплитуду рассеяния на двух одинаковых силовых центрах, находящихся на расстоянии a друг от друга, т. е. $U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) + U_0(\mathbf{r} - \mathbf{a})$, через амплитуду рассеяния f_0^B на одном центре $U_0(\mathbf{r})$.

Найти соотношения между сечениями рассеяния на двух и на одном центре в случаях:

а) $ka \ll 1$ (при этом величина kR может быть произвольной, R — радиус действия сил отдельного центра);

б) $kR \sim 1$ и $a \gg R$ (т. е. расстояние между центрами много больше радиуса действия сил отдельных центров).

13.14. Получить в борновском приближении выражение для амплитуды рассеяния на системе из N одинаковых центров, расположенных в точках \mathbf{a}_n , $n = 1, 2, \dots, N$, т. е. $U(\mathbf{r}) = \sum_n U_0(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_n|)$.

Применить полученный результат к анализу углового распределения рассеянных частиц в случае, когда центры распо-

жены вдоль прямой линии, причем расстояния между ближайшими центрами одинаковы и равны b , а импульс налетающих частиц направлен вдоль оси, на которой расположены рассеивающие центры. Специально обсудить случай $N \gg 1$.

Считая выполненными условия: $R \lesssim b$ (R — радиус действия потенциала отдельного центра), $bk \ll 1$, но $Nbk \gg 1$, найти полное сечение рассеяния частиц указанной цепочкой центров.

13.15. Найти во втором порядке теории возмущений амплитуду рассеяния частиц в поле $U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}$ при больших передачах импульса $qR \gg 1$. Сравнить с борновской амплитудой.

13.16. Сравнить при энергии частиц $E = 0$ значения точной амплитуды рассеяния $f^T(E = 0)$ в поле $U(r)$ с амплитудой рассеяния в борновском приближении $f^B(0)$ в этом поле в случаях:

а) поля отталкивания $U(r) \geq 0$;

б) поля притяжения $U(r) \leq 0$, в котором, однако, нет состояний дискретного спектра (потенциальная яма достаточно «мелкая»).

Показать, что в случае а) борновское значение сечения рассеяния больше точного, а в случае б), наоборот, меньше.

§ 2. Фазовая теория рассеяния. Рассеяние медленных частиц. Резонансные явления при рассеянии

13.17. Получить выражение для фазовых сдвигов $\delta_l(k)$ в условиях применимости борновского приближения непосредственно из разложения по парциальным волнам амплитуды рассеяния в центральном поле.

Указание. Воспользоваться известным из теории функций Бесселя соотношением ($x, y > 0$) [12]:

$$\frac{\sin \sqrt{x^2 + y^2 - 2xy \cos \varphi}}{\sqrt{x^2 + y^2 - 2xy \cos \varphi}} = \frac{\pi}{2\sqrt{xy}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) J_{l+1/2}(kx) J_{l+1/2}(ky) P_l(\cos \varphi).$$

13.18. Получить выражение для фазовых сдвигов в борновском приближении в случае обменного потенциала (см. 13.8).

13.19. В условиях применимости борновского приближения найти поведение фазовых сдвигов при энергии частицы $E \rightarrow 0$. Ограничиться потенциалами $U(r)$, убывающими при $r \rightarrow \infty$ быстрее любой степени r (например, $U \propto e^{-r/R}$).

13.20. Найти поведение борновских фазовых сдвигов $\delta_l^B(k)$ с фиксированным значением l при $k \rightarrow \infty$. Ограничиться случаем потенциалов, поведение которых при $r \rightarrow 0$ удовлетворяет условию $rU(r) \rightarrow 0$.

13.21. Используя квазиклассическое выражение для фазовых сдвигов, найти их поведение при фиксированном значении l и $E \rightarrow \infty$. Сравнить с результатом предыдущей задачи.

13.22. Найти в борновском приближении фазовые сдвиги s -волн ($l=0$) в полях:

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

Используя полученный результат, найти для указанных полей сечение рассеяния медленных частиц. Указать условия применимости и сравнить с результатами 13.4, а, б.

13.23. Восстановить потенциал взаимодействия $U(r)$ по фазе рассеяния $\delta_0(k)$ ($l=0$), считая ее известной при всех энергиях частицы и предполагая, что $|\delta_0(k)| \ll 1$.

В качестве иллюстрации полученного результата рассмотреть зависимости $\delta_0(k)$ вида:

а) $\delta_0(k) = \text{const}$; б) $\delta_0(k) = \frac{\alpha k}{1 + \beta k^2}$.

В случае б) сравнить с результатом 13.22, б.

13.24. Найти точные значения фазовых сдвигов s -волн в полях:

а) $U(r) = \begin{cases} \infty, & r < R, \\ 0, & r > R; \end{cases}$ б) $U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ 0, & r > R; \end{cases}$

в) $U(r) = -U_0 e^{-r/R}$.

Используя полученные результаты, найти для указанных полей сечения рассеяния медленных частиц. Указать условия применимости полученных выражений.

13.25. Найти длину рассеяния и сечение рассеяния медленных частиц в поле $U(r) = \alpha/r^4$, $\alpha > 0$.

13.26. Найти длину рассеяния и сечение рассеяния частиц с энергией $E = 0$ в поле

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & \frac{x^2 + y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} < 1, \quad c \geq b, \\ 0, & \frac{x^2 + y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} > 1. \end{cases}$$

Специально обсудить предельные случаи $c \approx b$ и $c \gg b$.

13.27. Найти энергетическую зависимость сечения рассеяния частиц $\sigma(E)$ в поле, спадающем на больших расстояниях по закону

$$U(r) \approx \alpha/r^n, \quad r \rightarrow \infty, \quad 2 < n < 3,$$

при энергии частиц $E \rightarrow 0$.

13.28. То же, что и в предыдущей задаче, в случае потенциала, имеющего на больших расстояниях вид $U(r) \approx \alpha/r^3$.

13.29. Найти фазовые сдвиги $\delta_l(k)$ в поле $U(r) = \alpha/r^2$, $\alpha > 0$.

Выполнить суммирование ряда, представляющего разложение амплитуды по парциальным волнам, в случаях:

а) $m\alpha/\hbar^2 \ll 1$, при произвольных углах рассеяния;

б) $m\alpha/\hbar^2 \geq 1$, при достаточно малых углах рассеяния;

в) $m\alpha/\hbar^2 \gg 1$, при рассеянии частиц назад ($\theta = \pi$).

Найти в указанных случаях дифференциальное сечение рассеяния частиц и сравнить его с результатами расчетов в борновском приближении и согласно классической механике.

13.30. Вычислить полное сечение рассеяния быстрых частиц $kR \gg 1$ идеально отражающей (непрозрачной) сферой радиуса R . Воспользоваться квазиклассическим выражением для фазовых сдвигов и оптической теоремой.

13.31. В условиях предыдущей задачи найти амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния для малых углов рассеяния $kR\theta \leq 1$ *).

13.32. То же, что и в предыдущей задаче, но в случае не очень малых углов рассеяния $\theta \gg (kR)^{-1}$. Сравнить с результатом классической механики.

13.33. Найти длину рассеяния в полях притяжения:

$$a) U(r) = -U_0 R \delta(r - R); \quad б) U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ 0, & r > R, \end{cases}$$

как функцию параметров потенциала U_0, R .

Чем примечательны значения параметров поля, при которых длина рассеяния обращается в бесконечность?

13.34. Вычислить сечение рассеяния медленных частиц в поле $U(r) = -\alpha \delta(r - R)$ в условиях резонанса в s -волне.

13.35. То же, что и в предыдущей задаче, в случае сферической потенциальной ямы глубины U_0 и радиуса R .

13.36. Найти парциальную амплитуду рассеяния частиц с $l = 0$ в поле $U(r) = \alpha \delta(r - R)$. В случае $\alpha R \gg \hbar^2/m$ определить положение E_0 и ширину Γ нижних квазидискретных уровней ($E_0 \sim \hbar^2/mR^2$).

Сравнить сечения рассеяния частиц с энергией $E \sim \hbar^2/mR^2$ на δ -функционной и непрозрачной сферах одинакового радиуса R . Каково значение разности этих сечений при энергии частиц, близкой к энергии квазидискретного s -уровня?

§ 3. Рассеяние быстрых частиц (приближение эйконала).

Рассеяние частиц со спином

13.37. Получить выражения для амплитуды рассеяния быстрых частиц в приближении эйконала ($q_{\perp} \approx q \approx k\theta$)

$$f(k, \theta) = ik \int_0^{\infty} \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz \right] \right\} J_0(k\rho\theta) \rho d\rho = \\ = \frac{ik}{2\pi} \iint \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz \right] \right\} e^{-iq_{\perp}\rho} d^2\rho$$

непосредственно из разложения ее по парциальным волнам.

*) Рассеяние под малыми углами в условиях, подобных данной задаче, называют дифракционным, так как по своей физической природе оно аналогично дифракции плоскопараллельного пучка света, падающего на непрозрачный (отражающий или поглощающий) экран (так называемая дифракция Фраунгофера, см. [5]); см. также 13.56.

Указать условия применимости полученного результата.

13.38. Показать, что в приближении эйконала для амплитуды рассеяния выполняется оптическая теорема (сравнить с 13.10 и 13.11).

13.39. Показать, что полное сечение рассеяния частиц в поле $U(r)$ быстрых частиц $kR \gg 1$ (R — радиус потенциала) может быть вычислено по формуле

$$\sigma(E) = 4\pi \int_0^\infty \left\{ 1 - \cos \left[\frac{m}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz \right] \right\} \rho d\rho$$

независимо от соотношения между энергией частиц и потенциальной энергией, т. е. для справедливости формулы не требуется выполнения условий применимости приближения эйконала.

Применить полученный результат к вычислению сечения рассеяния частиц потенциальным барьером: $U = 0$ при $r > R$ и $U = U_0$ при $r < R$.

13.40. Найти полное сечение рассеяния в поле $U(r) = \alpha/r^4$ ($\alpha > 0$) частиц с энергией, удовлетворяющей условию

$$\sqrt{\frac{mE}{\hbar^2}} \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} \gg 1.$$

13.41. Выразить в приближении эйконала амплитуду рассеяния частиц в поле двух силовых центров, находящихся на расстоянии a друг от друга, т. е. $U(\mathbf{r}) = U_0(r) + U_0(|\mathbf{r} - \mathbf{a}|)$, через амплитуду рассеяния f_0 на одном центре $U_0(r)$.

13.42. Оператор взаимодействия частицы со спином $s = 1/2$ с бесспиновой частицей имеет вид

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

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ — относительный радиус-вектор частиц, $\hat{\mathbf{I}} = -i[\mathbf{r}\nabla_{\mathbf{r}}]$ — оператор орбитального момента системы относительно центра масс.

Найти в борновском приближении амплитуду рассеяния при столкновении таких частиц друг с другом.

13.43. Найти в борновском приближении амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния быстрых нейтронов кулоновским полем.

13.44. Получить выражение для сечения рассеяния частиц со спином $s = 1/2$ на бесспиновых частицах в борновском приближении. Оператор взаимодействия частиц имеет вид, приведенный в 13.42.

Какова энергетическая зависимость полного сечения рассеяния при больших энергиях? Сравнить со случаем рассеяния бесспиновых частиц.

13.45. Какие ограничения накладывает условие эрмитовости гамильтониана на вид оператора взаимодействия частицы со спином $s = 1/2$ и бесспиновой частицы (см. 13.42)

$$\hat{U} = U_0(r) + U_1(r)\hat{\sigma}\hat{I}?$$

Какова поляризация рассеянных частиц в первом борновском приближении, если первоначально (до столкновения) они были не поляризованы?

13.46. Частицы со спином $s = 1/2$ до рассеяния на бесспиновых частицах были поляризованы: вектор поляризации $\mathbf{P} = 2\bar{s} \neq 0$. Показать, что в борновском приближении в результате рассеяния происходит лишь поворот вектора поляризации, так что $|\mathbf{P}'| = |\mathbf{P}|$, где \mathbf{P}' — вектор поляризации частиц после рассеяния (сравнить с предыдущей задачей).

13.47. Найти амплитуду рассеяния медленных нейтронов на протонах, учитывая, что их взаимодействие обладает следующими свойствами:

а) при квантовых числах $l = 0$ и $S = 1$ имеется связанное состояние — дейтрон, энергия связи которого мала ($\epsilon_d \ll \hbar^2/mR^2$, R — радиус взаимодействия);

б) при $l = 0$ и $S = 0$ имеется мелкий виртуальный уровень;

в) при малой энергии системы «нейтрон + протон» потенциал взаимодействия можно считать центральным, зависящим, однако, от величины S суммарного спина, т. е. $\hat{U} = U_0(r) + U_1(r)\hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_p$.

§ 4. Рассеяние составных частиц. Неупругие столкновения

13.48. Найти дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния быстрых электронов атомом водорода, находящимся в основном состоянии.

13.49. То же, что и в предыдущей задаче, для атома гелия. Волновую функцию атома выбрать на основании вариационного расчета, проведенного в 11.7.

13.50. Найти полное сечение возбуждения $2s$ -состояния атома водорода при столкновении быстрых электронов с атомами водорода, находящимися в основном состоянии.

13.51. Найти дифференциальное и полное сечения возбуждения ядра электронами при монополюсном (или $E0$ -) переходе ядра, т. е. когда начальное и конечное состояния ядра имеют одинаковые момент $J = 0$ и четность. Электроны в начальном и конечном состояниях считать быстрыми.

13.52. Сферический ротатор, имеющий момент инерции I , заряд $e = 0$ и электрический дипольный момент \mathbf{d} , параллельный оси ротатора (простейшей моделью такого ротатора является система из двух частиц с зарядами противоположного

знака, находящихся на заданном расстоянии друг от друга), находится в основном состоянии.

Вычислить в первом порядке теории возмущений дифференциальное и полное сечения неупругого рассеяния заряженных частиц ротатором с возбуждением его l -го уровня.

13.53. Найти сечение рассеяния тяжелых заряженных частиц (например, протонов или ионов) нейтральными атомами, имеющими момент, равный нулю. Скорость рассеиваемых частиц считать много меньшей скоростей атомных электронов. Указать условия применимости полученного результата.

Указание. Предварительно показать, что в процессе рассеяния существенны расстояния, много большие атомных. Воспользоваться квазиклассическим выражением для сечения рассеяния (см. 13.39).

13.54. Определить сечения упругого и неупругого рассеяния медленных частиц комплексной потенциальной ямой

$$U(r) = \begin{cases} U_0 - iU_1, & r < R, \quad U_1 > 0, \\ 0, & r > R \end{cases}$$

(по поводу физической интерпретации мнимой части потенциала см. 7.9). Считать выполненными условия $|U_{0,1}| \ll \hbar^2/mR^2$.

13.55. Найти полное сечение $\sigma_{\text{полн}}$, сечение упругого $\sigma_{\text{упр}}$ и неупругого $\sigma_{\text{неупр}}$ рассеяния быстрых частиц $kR \gg 1$ поглощающей («черной») сферой радиуса R . Сравнить с результатом 13.30.

Указание. Воспользоваться квазиклассическими представлениями о движении частиц. Считать, что все частицы, достигающие поверхности сферы, поглощаются ею.

13.56. В условиях предыдущей задачи найти дифференциальное сечение упругого рассеяния частиц. Сравнить с результатом 13.31.

13.57. Найти соотношения между амплитудами и дифференциальными сечениями упругого рассеяния нейтрона на протоне и нейтрона на атоме водорода, находящемся в основном состоянии. Взаимодействием магнитного момента нейтрона с электроном пренебречь. Указать условия применимости полученного результата.

13.58. Как известно, в результате взаимодействия электрона с позитроном может произойти их аннигиляция, т. е. превращение пары в фотоны. Поэтому уровни энергии позитрония (водородоподобного «атома», состоящего из электрона и позитрона) имеют конечное время жизни.

Найти соотношение между временем жизни основного состояния позитрония и сечением аннигиляции пары при столкновении медленного позитрона с электроном. Считать, что взаимодействие, ответственное за аннигиляцию, имеет радиус, малый по сравнению с размерами позитрония, и его можно рассматри-

вать как возмущение (конкретный вид этого взаимодействия не существует).

13.59. С помощью принципа детального равновесия связать сечения радиационного захвата нейтрона протоном и фоторасщепления дейтрона.

Указание. Принцип детального равновесия и основанное на нем соотношение между сечениями взаимно обратных двухчастичных реакций в курсах квантовой механики обычно выводятся для нерелятивистских частиц (см., например, [3]). Однако если в соответствующих окончательных выражениях понимать под величиной импульса относительного движения двух частиц величину импульса этих частиц в с. ц. и., то они непосредственно переносятся на случай релятивистских частиц. В связи с этим напомним, что в нерелятивистской механике $p_{\text{отн}} = \mu v_{\text{отн}} = |\mathbf{p}_1| = |\mathbf{p}_2|$, где $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2$ — импульсы частиц в с. ц. и., μ — их приведенная масса, $v_{\text{отн}} = v_1 - v_2$.

13.60. Найти соотношение между сечениями фотоэффекта с основного состояния атома водорода и радиационной рекомбинации электрона с протоном (процесс, обратный фотоэффекту) в основное состояние атома водорода. Спином протона и связанным с ним магнитным моментом можно пренебречь.

Г л а в а 14

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

§ 1. Излучение фотонов

14.1. Найти время жизни и ширину возбужденного $2p$ -состояния атома водорода (спином электрона пренебречь).

Применить полученный результат к μ -мезоатому и сравнить со временем жизни свободного мюона ($\tau_\mu = 2,2 \cdot 10^{-6}$ с).

14.2. Найти время жизни первого возбужденного уровня заряженного сферического осциллятора.

14.3. Показать, что дипольные (электрические) переходы между:

а) уровнями атома с различной мультиплетностью (например, между состояниями орто- и парагелия),

б) компонентами тонкой структуры одного и того же терма атома (т. е. между различными уровнями одного и того же мультиплета)

запрещены.

14.4. Для $2s_{1/2}$ -состояния атома водорода оценить вероятность электромагнитного перехода (в единицу времени *) в $2p_{1/2}$ -состояние.

*) В ряде последующих задач эта оговорка для краткости опускается.

Напомним, что разность энергий $2s_{1/2}$ - и $2p_{1/2}$ -уровней (так называемый лэмбовский сдвиг) составляет $\Delta E_{Ls} \approx 4,4 \times 10^{-6}$ эВ.

Полученный результат сравнить с вероятностью перехода $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ с излучением двух фотонов, равной $\omega_{2\gamma} = 7 \text{ с}^{-1}$, и с результатом 14.8.

14.5. Найти вероятность электромагнитного перехода сферического ротатора, находящегося на первом возбужденном уровне, в основное состояние.

Ротатор имеет момент инерции I и электрический дипольный момент \mathbf{d} , направленный вдоль оси ротатора.

Указание. Взаимодействие ротатора с полем излучения имеет вид $\hat{V} = -\mathbf{d}\hat{\mathcal{E}}_{\text{rad}}$, где $\hat{\mathcal{E}}_{\text{rad}}(\mathbf{r})$ — оператор электрического поля фотонов.

14.6. Найти вероятность электромагнитного перехода между ротационными уровнями двухатомной молекулы, имеющей постоянный дипольный момент d . Электронный терм молекулы ${}^1\Sigma$. Ограничиться случаем первого возбужденного ротационного уровня.

Произвести численную оценку вероятности перехода.

14.7. Свободная нейтральная частица со спином $s = 1/2$, имеющая спиновый магнитный момент μ (так что $\hat{\mu} = \mu\hat{\sigma}$), находится в однородном магнитном поле \mathcal{H}_0 в состоянии с определенным значением проекции спина на направление поля. Найти вероятность излучения фотона в единицу времени в результате переворота спина.

14.8. Найти вероятность однофотонного перехода атома водорода из возбужденного $2s_{1/2}$ -состояния в основное $1s_{1/2}$ -состояние. Сравнить полученное значение с результатом 14.4.

14.9. Найти вероятность электромагнитного перехода между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода (см. 11.4).

14.10. Какова мультипольность излучения для доминирующих электромагнитных переходов между компонентами тонкой структуры одного и того же терма атома?

Оценить численное значение вероятности соответствующих электромагнитных переходов в единицу времени.

14.11. Показать, что один фотон не может находиться в состоянии с равным нулю полным моментом.

Указание. При отыскании волновых функций (в импульсном представлении) состояний фотона с определенным значением J воспользоваться тензорным формализмом, развитым в задачах § 4 главы 3.

14.12. Показать, что система из двух фотонов не может находиться в состояниях с равным единице полным моментом $J = 1$ (в системе центра инерции). См. указание к предыдущей задаче; учесть тождественность фотонов.

§ 2. Рассеяние фотонов. Излучение фотонов при столкновениях

14.13. Найти дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния фотонов свободной заряженной частицей. Сравнить с результатом классической электродинамики.

14.14. Найти дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния фотонов сферическим ротатором, находящимся в основном состоянии.

Ротатор имеет момент инерции I и электрический дипольный момент \mathbf{d} , направленный вдоль оси ротатора.

14.15. Найти дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния фотонов заряженным сферическим осциллятором, находящимся в основном состоянии.

14.16. Найти дифференциальное и полное сечения рассеяния фотонов нейтральной частицей со спином $s = 1/2$, имеющей магнитный момент μ (так что $\hat{\mu} = \mu\hat{\sigma}$).

Рассмотреть следующие случаи:

а) до рассеяния частица находится в состоянии с определенным значением проекции спина на ось z (вдоль которой направлен импульс падающих фотонов) $s_z = +1/2$, и в процессе рассеяния спиновое состояние частицы не изменяется;

б) то же, что и в предыдущем пункте, но в процессе рассеяния происходит переворот спина частицы, т. е. в конечном состоянии (после столкновения) $s_z = -1/2$;

в) рассеяние на неполяризованных частицах.

14.17. Найти дифференциальное и полное сечения неупругого рассеяния фотонов сферическим ротатором в основном состоянии, сопровождающегося возбуждением ротатора, во втором порядке теории возмущений. Какие состояния ротатора при этом возбуждаются?

Ротатор имеет момент инерции I и электрический дипольный момент \mathbf{d} , направленный вдоль оси ротатора *).

14.18. Для частицы в поле $U(\mathbf{r})$ доказать справедливость следующих соотношений (так называемых «правил сумм»):

$$а) \sum_m |\langle m | x | n \rangle|^2 = \langle n | x^2 | n \rangle;$$

$$б) \sum_m \omega_{mn} |\langle m | x | n \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2\mu};$$

$$в) \sum_m \omega_{mn}^2 |\langle m | x | n \rangle|^2 = \frac{1}{\mu^2} \langle n | \hat{p}_x^2 | n \rangle;$$

$$г) \sum_m \omega_{mn}^3 |\langle m | x | n \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2\mu^2} \langle n | \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} | n \rangle,$$

*) Решение аналогичной задачи для заряженного сферического осциллятора показывает, что в этом случае во втором порядке теории возмущений в дипольном приближении процессы неупругого рассеяния фотонов не происходят (сравнить с 14.15).

где μ — масса частицы, суммирование проводится по всем стационарным состояниям, $|n\rangle$ — стационарное состояние дискретного спектра.

14.19. Выразить сечение рассеяния фотонов малой энергии $\hbar\omega \rightarrow 0$ атомом, находящимся в стационарном состоянии с моментом, равным нулю, через поляризуемость атома.

14.20. Найти сечение фотоэффекта для водородоподобного атома, находящегося в основном состоянии. Предполагается, что энергия фотонов удовлетворяет условию $\hbar\omega \gg I$, где I — потенциал ионизации.

14.21. Найти сечение радиационной рекомбинации быстрого электрона с покоящимся протоном (процесс, обратный фотоэффекту) с образованием атома водорода в основном состоянии.

14.22. Найти дифференциальное и полное сечения фоторасщепления дейтрона, т. е. процесса $\gamma + d \rightarrow p + n$.

Указание. Для волновой функции дейтрона воспользоваться приближенным выражением, установленным в 12.3. Протон и нейтрон в конечном состоянии рассматривать как свободные. Расчет провести в дипольном приближении.

14.23. Найти дифференциальное сечение тормозного излучения электрона в кулоновском поле ядра. Исследовать угловое и спектральное распределения излучаемых фотонов. Взаимодействие электрона с ядром рассматривать как возмущение.

Г л а в а 15

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ВОЛНОВЫЕ УРАВНЕНИЯ

§ 1. Уравнение Клейна — Гордона

15.1. Показать, что если $\Psi^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$ представляет волновой пакет, составленный из частных решений уравнения Клейна — Гордона, отвечающих энергии (или частоте) определенного знака (либо $\epsilon \geq mc^2$, либо $\epsilon \leq -mc^2$), то независимо от конкретного вида такой суперпозиции значение сохраняющейся во времени величины

$$Q^{(\pm)} = \int \rho^{(\pm)}(\mathbf{r}, t) dV = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi^{(\pm)*} \frac{\partial \Psi^{(\pm)}}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^{(\pm)*}}{\partial t} \Psi^{(\pm)} \right\} dV$$

является знакоопределенным.

15.2. Показать, что уравнение Клейна — Гордона для свободной частицы инвариантно относительно *антилинейного* преобразования функции

$$\Psi \rightarrow \Psi_c(\mathbf{r}, t) = \hat{C}\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi^*(\mathbf{r}, t).$$

Преобразование \hat{C} представляет *зарядовое сопряжение*. Оно позволяет поставить в соответствие не имеющим непосредственного физического смысла решениям $\Psi^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ уравнения

($\Psi^{(-)}$ — суперпозиция частных решений, отвечающих формально отрицательной энергии частицы) функцию $\Psi_c^{(+)} = \hat{C}\Psi^{(-)}$, отвечающую уже положительным энергиям и интерпретируемую как волновая функция *античастицы*.

Убедиться в том, что если функция Ψ является собственной функцией какого-либо из операторов $\hat{e} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, \hat{p} , \hat{l}_z , \hat{I}^2 , то соответствующая *зарядово-сопряженная* функция Ψ_c также является собственной функцией. Как связаны собственные значения указанных операторов для таких функций?

15.3. а) Какой вид принимает уравнение Клейна — Гордона для заряженной бесспиновой частицы во внешнем электромагнитном поле при преобразовании функции

$$\Psi \rightarrow \Psi_c(\mathbf{r}, t) = \hat{C}\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi^*(\mathbf{r}, t)?$$

б) Какое преобразование электромагнитного поля следует осуществить одновременно с указанным преобразованием функции $\Psi(\mathbf{r}, t)$, чтобы получающееся при этом уравнение имело такой же вид, как и исходное?

в) На основании полученных результатов дать интерпретацию преобразования \hat{C} как преобразования зарядового сопряжения, осуществляющего переход от частицы к античастице (сравнить с 15.2).

15.4. Показать, что внешнее скалярное (по отношению к преобразованию Лоренца) поле оказывает одинаковое действие на бесспиновую частицу и соответствующую ей античастицу. Сравнить со случаем частицы во внешнем электромагнитном поле (см. 15.3).

Указание. Уравнение, описывающее бесспиновую частицу во внешнем скалярном поле $U(\mathbf{r}, t)$, имеет вид

$$\{c^2\hat{p}^2 + m^2c^4 + 2mc^2U\}\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi.$$

Не следует путать скалярное поле с электростатическим (последнее представляет временную компоненту 4-вектора). В нерелятивистском пределе $U(\mathbf{r}, t)$ имеет смысл обычной потенциальной энергии.

15.5. Показать, что внутренние четности бесспиновой частицы и соответствующей ей античастицы — одинаковые.

15.6. Основываясь на сохранении величины Q (см. 15.1), обсудить вопрос об ортогональности и нормировке функций $\Psi_{p, \epsilon}(\mathbf{r}, t)$, являющихся решениями уравнения Клейна — Гордона, отвечающими определенным значениям энергии (обоих знаков) и импульса.

15.7. Показать, что для бесспиновой частицы в релятивистском случае можно сохранить обычную интерпретацию волновой функции в импульсном представлении как амплитуды

вероятности импульса (в отличие от координатного представления, см. 15.1).

Какова связь волновых функций частицы и античастицы в импульсном представлении с решениями $\Psi^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона?

Сравнить с нерелятивистским случаем.

15.8. Получить выражение для среднего значения энергии свободной бесспиновой частицы в произвольном состоянии, описываемом решением $\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона.

15.9. То же, что и в предыдущей задаче, но для среднего значения импульса частицы.

15.10. То же, что и в предыдущих двух задачах, но для среднего значения момента частицы.

15.11. Найти в релятивистском случае энергетический спектр заряженной бесспиновой частицы, находящейся в однородном магнитном поле.

Сравнить с нерелятивистским случаем.

15.12. Найти энергетический спектр s -состояний бесспиновой частицы во внешнем скалярном поле (см. 15.4) вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

Каков энергетический спектр античастицы в таком поле?

Обсудить трудности в интерпретации энергетического спектра, возникающие при значительном углублении ямы.

15.13. Найти энергетические уровни дискретного спектра заряженной бесспиновой частицы (заряд $-e$) в кулоновском поле ядра с зарядом Ze (ядро считать точечным и бесконечно тяжелым).

В случае $Z\alpha \ll 1$ ($\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$) сравнить полученный результат с соответствующим выражением нерелятивистской теории.

Обратить внимание на трудности, возникающие в интерпретации энергетического спектра при достаточно больших значениях заряда ядра, и объяснить их причину.

15.14. Непосредственно из уравнения Клейна — Гордона для свободной частицы:

а) получить в нерелятивистском пределе уравнение Шредингера;

б) найти первую релятивистскую поправку к полученному уравнению.

15.15. Непосредственно из стационарного уравнения Клейна — Гордона для заряженной бесспиновой частицы, находящейся в постоянном электромагнитном поле:

а) получить в нерелятивистском пределе уравнение Шредингера;

б) найти первую релятивистскую поправку к полученному уравнению.

15.16. Показать, что в достаточно сильном электростатическом поле заряженная бесспиновая частица испытывает притяжение (в квантовомеханическом смысле) независимо от знака ее заряда.

15.17. Найти в борновском приближении амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния релятивистской заряженной (заряд e_1) бесспиновой частицы в кулоновском поле ядра с зарядом Ze (ядро считать бесконечно тяжелым).

Сравнить со случаем нерелятивистской частицы.

Указать условия применимости полученных результатов.

15.18. Найти в борновском приближении энергетическую зависимость сечения рассеяния $\sigma(\epsilon)$ заряженной бесспиновой частицы во внешнем электростатическом поле $\phi(r)$ при $\epsilon \rightarrow \infty$.

Указать условия применимости полученного результата; сравнить его с результатом нерелятивистской теории.

15.19. Найти в борновском приближении энергетическую зависимость сечения рассеяния $\sigma(\epsilon)$ бесспиновой частицы во внешнем скалярном поле $U(r)$ (см. указание к 15.4) при $\epsilon \rightarrow \infty$.

Указать условия применимости полученного результата; сравнить его с результатами нерелятивистской теории и предыдущей задачи.

§ 2. Уравнение Дирака

В задачах этого параграфа использовано следующее представление четырехрядных матриц Дирака:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix}, \quad \beta = \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\gamma = i\beta\alpha = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma \\ -i\sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

где σ , 1 , 0 означают двухрядные матрицы Паули, единичную и нулевую *).

15.20. Выяснить, какие из указанных ниже операторов коммутируют с гамильтонианом свободной релятивистской частицы со спином $s = 1/2$ (и тем самым являются интегралами движения):

- 1) $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$; 2) $\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\hbar} [\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}] = -i[\mathbf{r}\nabla]$; 3) $\hat{\mathbf{l}}^2$; 4) $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\Sigma$; 5) $\hat{\mathbf{s}}^2$;
- 6) $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$; 7) $\hat{\mathbf{j}}^2$; 8) $\hat{\Lambda} = \hat{\mathbf{p}}\Sigma$; 9) $\hat{l}[\hat{l}\Psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi(-\mathbf{r})]$; 10) $\hat{P} \equiv \beta\hat{l}$;
- 11) γ_5 .

Сравнить со случаем свободной нерелятивистской частицы.

*) В задачах и решениях этого параграфа символ оператора $\hat{}$ над матрицами α , β , γ , Σ , γ_5 , σ , 1 , 0 не ставится.

15.21. Найти решения уравнения Дирака, описывающие свободную частицу, имеющую определенные импульс и энергию.

Для конкретизации спинового состояния частицы воспользоваться коммутативностью оператора $\hat{\Lambda} = \Sigma \hat{\mathbf{p}}$ с операторами $\hat{\mathbf{p}}$ и \hat{H} (см. также 15.26).

15.22. Найти компоненты 4-вектора плотности тока свободной дираковской частицы в состоянии, характеризующемся определенным значением ее импульса.

Сравнить с соответствующими выражениями нерелятивистской теории.

15.23. Найти среднее значение вектора спина дираковской частицы, имеющей определенный импульс (при этом спиновое состояние частицы — произвольное). Считать для простоты, что импульс направлен вдоль оси z .

Сравнить с результатом нерелятивистской теории.

15.24. Рассмотреть унитарное преобразование биспиноров, задаваемое унитарным оператором (матрицей) $\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$.

Какой вид имеют в новом представлении оператор спина частицы и уравнение Дирака для двухкомпонентных спиноров ($\Psi' = \hat{U}\Psi \equiv \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$)?

15.25. Считая известным спиновое состояние в системе покоя частицы, найти биспинор $u(\mathbf{p})$ в произвольной системе координат, в которой частица имеет импульс \mathbf{p} .

Используя полученный результат, найти связь средних значений вектора спина частицы в указанных системах координат.

15.26. Как известно (см. 15.21), для частицы со спином $s = 1/2$ волновая функция состояния с импульсом \mathbf{p} и энергией $\epsilon = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$ имеет вид

$$\Psi_{\mathbf{p}} = u(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \epsilon t)}; \quad u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{\epsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix}.$$

Указанное состояние является двукратно вырожденным (существует два независимых способа выбора спинора φ), что связано со спиновой степенью свободы. Рассмотрим два таких независимых состояния, различающиеся выбором спинора φ в виде φ_{λ} , где

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})\varphi_{\lambda} = \lambda\varphi_{\lambda}$$

(\mathbf{n} — произвольный единичный вектор, $\lambda = \pm 1$, см. 5.12).

Убедиться в ортогональности спиновых состояний релятивистской частицы, отвечающих различным значениям λ .

Учитывая результат предыдущей задачи, выяснить физический смысл вектора \mathbf{n} и соответствующих собственных значений λ .

Каков смысл вектора $\frac{1}{2} \mathbf{f}^* \boldsymbol{\sigma} \mathbf{f}$ при нормировке $\mathbf{f}^* \mathbf{f} = 1$?

15.27. Найти явный вид волновой функции состояния античастицы, соответствующего решению уравнения Дирака с определенным импульсом \mathbf{p} и отрицательной энергией $\epsilon = -\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$ частицы. Сравнить с волновой функцией физического состояния частицы (с энергией $\epsilon \geq mc^2$ и определенным импульсом).

Какие квантовые числа — импульс, энергию и спиральность — имеет античастица в состоянии, отвечающем решению $\Psi_{\text{рел}}$ уравнения Дирака с отрицательной энергией частицы?

15.28. Показать, что для дираковской частицы с массой $m = 0$ оператор (матрица) γ_5 коммутирует с гамильтонианом свободной частицы.

Найти собственные значения указанного оператора и выяснить их физический смысл.

15.29. Показать, что операторы (матрицы) $\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm \gamma_5)$ являются проекционными.

Для дираковской частицы с массой $m = 0$ эти операторы коммутируют с гамильтонианом. На какие состояния частицы и античастицы проектируют указанные операторы \hat{P}_{\pm} ?

15.30. Квантовомеханическое описание фотона может быть осуществлено с помощью двух векторов $\mathfrak{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathfrak{H}(\mathbf{r}, t)$, удовлетворяющих таким же уравнениям, как уравнения Максвелла классической электродинамики для свободного электромагнитного поля $\mathfrak{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathfrak{H}(\mathbf{r}, t)$ (т. е. для электромагнитных волн в вакууме).

Показать, что эти уравнения можно представить в виде, аналогичном уравнениям Дирака для двухкомпонентных спиноров (следует учесть, что масса фотона $m = 0$, а его спин $s = 1$).

15.31. Найти нерелятивистский предел (с точностью до членов порядка « $1/c$ » включительно) выражений для плотности заряда и тока дираковской частицы, находящейся во внешнем электромагнитном поле.

15.32. Гамильтониан частицы со спином $s = 1/2$, находящейся во внешнем электромагнитном поле, имеет вид

$$\hat{H} = c \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + mc^2 \beta + \frac{i\kappa}{2} F_{\mu\nu} \beta \gamma_{\mu} \gamma_{\nu},$$

где κ — некоторый параметр, характеризующий частицу, $F_{\mu\nu}$ — тензор электромагнитного поля.

Рассмотрев нерелятивистский предел (с точностью до членов порядка « $1/c$ » включительно) волнового уравнения*) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$, выяснить физический смысл параметра κ , т. е.

*) Это уравнение можно записать в явно релятивистски-инвариантном виде:

$$\left(i c \hat{\rho} + \frac{i\kappa}{2} F_{\mu\nu} \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} + mc^2 \right) \Psi = 0 \quad \left(\hat{\rho} \equiv \hat{\rho}_{\mu} \gamma_{\mu} = \hat{\mathbf{p}} \boldsymbol{\gamma} - \frac{\hbar}{c} \gamma_4 \frac{\partial}{\partial t} \right).$$

установить его связь с электромагнитными характеристиками частицы. Сравнить со случаем заряженных дираковских частиц — электрона и мюона, гамильтониан которых имеет вид

$$\hat{H}_D = c\alpha \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + mc^2\beta + eA_0.$$

15.33. Найти энергетический спектр заряженной дираковской частицы в однородном магнитном поле.

15.34. Найти в первом порядке теории возмущений дифференциальное сечение рассеяния дираковской частицы в кулоновском поле ядра с зарядом Ze . Ядро считать бесконечно тяжелым,

Указание. Воспользоваться теорией возмущений для переходов в непрерывном спектре под действием стационарного возмущения; см. также 15.37.

15.35. Найти в первом порядке теории возмущений энергетическую зависимость сечения рассеяния $\sigma(\epsilon)$ заряженной дираковской частицы во внешнем электростатическом поле $A_0(r)$ при $\epsilon \rightarrow \infty$.

Сравнить с результатом 15.18.

15.36. Найти функции Грина $\hat{G}_{\epsilon; \alpha\beta}^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ стационарного уравнения Дирака для свободной частицы при энергии $\epsilon \geq mc^2$, удовлетворяющие уравнению

$$(\hat{H} - \epsilon)\hat{G}_\epsilon \equiv (-i\hbar c\alpha\nabla + mc^2\beta - \epsilon)\hat{G}_\epsilon = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

и имеющие при $r \rightarrow \infty$ асимптотики вида

$$G_\epsilon^{(\pm)} \propto \frac{1}{r} e^{\pm ikr}, \quad k = \sqrt{\frac{\epsilon^2 - m^2c^4}{\hbar^2c^2}}.$$

Найти также функцию Грина $\hat{f}_\epsilon^{(\pm)}$ уравнения Дирака, записанного в симметричной форме: $(ic\hat{p} + mc^2)\Psi_\epsilon = 0$, $\hat{p} \equiv -i\hbar\nabla + \frac{i\epsilon}{c}\gamma_4$.

15.37. Найти в борновском приближении амплитуду рассеяния дираковской частицы во внешнем постоянном электромагнитном поле.

Применить полученный результат к случаю электростатического поля $A_0 = Ze/r$ и сравнить с 15.34.

Г л а в а 16

ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

§ 1. Кинематика распадов и столкновений

16.1. Покоящаяся частица A распадается на три частицы a : $A \rightarrow 3a$. Энергия распада *) равна Q_0 .

В каких пределах заключены кинетические энергии ϵ_a распадающих частиц?

*) *Энергией распада* называют разность внутренних энергий распадающейся частицы и частиц, образующихся при распаде.

16.2. Покоящаяся частица A распадается на три частицы a : $A \rightarrow 3a$. Энергия распада равна Q_0 . Так как $\sum_n \epsilon_n = Q_0$ (ϵ_n — кинетическая энергия n -й частицы), то можно поставить в соответствие распаду точку внутри равностороннего треугольника с высотой $h = Q_0$ такую, что расстояния от этой точки до сторон треугольника определяют энергии распадных частиц. Однако, в силу закона сохранения импульса в распаде, не всякой точке внутри треугольника можно сопоставить разрешенный по кинематике распад частицы A .

Показать, что точками треугольника, которым можно сопоставить распад $A \rightarrow 3a$, являются точки круга, вписанного в треугольник.

16.3. Пусть $\mathbf{p}_a, E_a; \mathbf{p}_b, E_b$ — импульсы и кинетические энергии частиц a и b в некоторой системе координат.

Показать, что следующая комбинация этих величин:

$$s = -(\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b)^2 + 2(m_a + m_b)(E_a + E_b),$$

во всех инерциальных системах отсчета имеет одно и то же значение, т. е. является галилеевски-инвариантной величиной.

Считая, что частицы a и b являются продуктами распада некоторой частицы A : $A \rightarrow a + b$, найти связь s с энергией распада Q_0 .

16.4. То же, что и в предыдущей задаче, но для величины

$$t = -(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)^2 + 2(m_a - m_b)(E_a - E_b).$$

16.5. При столкновении частицы a с покоящейся частицей b происходит возбуждение частицы b . Энергия возбуждения равна Q_0 .

Найти минимальное (так называемое пороговое) значение кинетической энергии частицы a , при котором может идти такой процесс. Рассмотреть предельные случаи $m_a \ll m_b$ и $m_a \gg m_b$.

16.6. В результате столкновения частиц a и b происходит возбуждение частицы b . Энергия возбуждения равна Q_0 .

Построить диаграмму столкновений, позволяющую графическим способом определять соотношения между импульсами частиц до и после столкновения в системе центра инерции и в лабораторной системе координат. В чем отличие диаграммы столкновений такого процесса от случая упругого рассеяния (см. [4])?

16.7. Рассмотреть следующие величины, характеризующие кинематику упругого столкновения частиц a и b :

$$s = -(\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b)^2 + 2(m_a + m_b)(E_a + E_b), \quad t = -(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}'_a)^2,$$

$$u = -(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}'_b)^2 + 2(m_a - m_b)(E_a - E'_b),$$

где $\mathbf{p}_a, E_a; \mathbf{p}'_a, E'_a$ — импульс и кинетическая энергия частицы a соответственно до и после столкновения (аналогичные обозначения — для частицы b).

Показать, что значения указанных величин не зависят от системы отсчета, т. е. они — галилеевски-инвариантные величины.

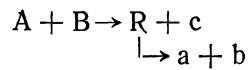
Выразить s, t, u через кинетическую энергию частиц и угол рассеяния в системе центра инерции.

Являются ли все три величины независимыми?

16.8. В результате столкновения составных частиц A и B происходит реакция $A + B \rightarrow a + b + c$, т. е. в конечном состоянии образуются три частицы.

Возможны два механизма такого процесса:

1) частицы a и b являются продуктами распада некоторой нестабильной частицы R , т. е. процесс $A + B \rightarrow a + b + c$ идет в две стадии:



(энергия распада $R \rightarrow a + b$ равна Q_0);

2) все частицы в конечном состоянии образуются независимо в том смысле, что между их импульсами нет жесткой динамической корреляции (не считая, конечно, кинематической корреляции, обусловленной законами сохранения энергии и импульса).

Как, зная распределение по импульсам частиц в конечном состоянии, различить эти два механизма реакции?

Указание. Рассмотреть распределение по величине

$$s = -(\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b)^2 + 2(m_a + m_b)(E_a + E_b).$$

§ 2. Интегралы движения *)

16.9. Показать, что если некоторое преобразование координат системы оставляет ее гамильтониан неизменным, то оператор этого преобразования коммутирует с гамильтонианом. В частности, рассмотрев для системы из N частиц преобразования координат:

$$a) \text{ сдвига } \mathbf{r}_n \rightarrow \mathbf{r}'_n = \mathbf{r}_n + \mathbf{a};$$

*) Интегралы движения использовались при решении многих задач из других глав (см., например, систематическое использование интеграла момента в задачах с центральной симметрией).

В задачах данного параграфа особое внимание уделяется вопросу *отыскания* интегралов движения, связанных с определенными свойствами симметрии рассматриваемых квантовомеханических систем (без конкретизации вида взаимодействия).

Разумеется, некоторые задачи из других глав (такие, как 1.29, 4.26, 4.27, 6.19 и др.) можно было бы поместить и в данном параграфе.

б) поворота на угол $\varphi_0 = \varphi_0 \mathbf{n}_0$ (\mathbf{n}_0 — единичный вектор вдоль оси поворота системы координат, φ_0 — величина угла поворота);

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

показать, что из инвариантности гамильтониана относительно этих преобразований следует существование у рассматриваемой системы механических интегралов движения: импульса, орбитального момента и четности.

16.10. Указать, какие из механических величин или их комбинаций (энергия, проекции и квадрат момента, проекции импульса, четность) сохраняются при движении системы N бесспиновых частиц в следующих полях:

- 1) при свободном движении;
- 2) в поле бесконечного однородного цилиндра;
- 3) в поле бесконечной однородной плоскости;
- 4) в поле однородного шара;
- 5) в поле бесконечной однородной полуплоскости;
- 6) в поле двух точек;
- 7) в однородном переменном поле;
- 8) в поле равномерно заряженного прямого провода с переменным зарядом;
- 9) в поле однородного трехосного эллипсоида;
- 10) в поле бесконечной однородной цилиндрической винтовой линии;
- 11) в поле однородного конуса: а) однополостного, б) двухполостного;
- 12) в поле кругового тора.

16.11. Показать, что если f_1 и f_2 — интегралы движения некоторой системы, то $\hat{g}_1 = (f_1 f_2 + f_2 f_1)$ и $\hat{g}_2 = i(f_1 f_2 - f_2 f_1)$ также являются интегралами движения.

16.12. Показать, что если у некоторой системы P_x и J_z — интегралы движения, то P_y также является интегралом движения.

Объяснить полученный результат, исходя из свойств симметрии рассматриваемой системы, обеспечивающих сохранение P_x и J_z .

16.13. Показать, что если у некоторой системы J_x и J_y — интегралы движения, то J_z и, соответственно, \mathbf{J}^2 также являются интегралами движения.

Объяснить полученный результат, исходя из свойств симметрии рассматриваемой системы, обеспечивающих сохранение J_x и J_y .

16.14. Гамильтониан частицы со спином $s = 1/2$ имеет вид:

$$а) \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U_0(r) + U_1(r) (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \hat{\mathbf{l}});$$

$$б) \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U_0(r) + U_1(r) \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \frac{\mathbf{r}}{r} \right).$$

Указать интегралы движения.

Найти спин-угловую зависимость волновых функций стационарных состояний дискретного спектра.

16.15. Нейтральная частица со спином $s = 1/2$, имеющая спиновый магнитный момент μ_0 (например, нейтрон), находится в аксиально симметричном магнитном поле вида (в цилиндрических координатах):

$$a) \mathcal{H}_\rho = \mathcal{H}_\varphi = 0, \quad \mathcal{H}_z = \mathcal{H}(\rho);$$

$$b) \mathcal{H}_\rho = \mathcal{H}_z = 0, \quad \mathcal{H}_\varphi = \mathcal{H}(\rho).$$

Указать интегралы движения.

16.16. Показать, что для частицы в однородном поле оператор

$$\hat{\mathbf{G}} = \hat{\mathbf{p}} - \mathbf{F}_0 t$$

(\mathbf{F}_0 — сила, действующая на частицу) является интегралом движения.

Какой смысл имеет среднее значение $\langle \mathbf{G} \rangle$?

Сравнить с результатом классической механики.

§ 3. Сохранение момента и четности в распадах и столкновениях. Изотопические соотношения *)

16.17. Установить, какие ограничения на квантовые числа (спин J_A и внутренняя четность P_A) нейтральной частицы A^0 следуют из факта существования распадов этой частицы на два π -мезона ($J_\pi^P = 0^-$ **):

$$a) A^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-; \quad b) A^0 \rightarrow 2\pi^0.$$

Считая, что покоящаяся распадающаяся частица находится в состоянии с определенным значением проекции спина $J_z = M$ на ось z , найти угловое распределение продуктов распада.

16.18. Для распада векторной частицы V ($J^P = 1^-$) на два π -мезона: $V \rightarrow \pi^+ \pi^-$ — найти наиболее общий вид углового распределения продуктов распада в системе покоя частицы V .

Состояние частицы V описывается поляризационной матрицей плотности ρ_{mm} , где m — проекция спина частицы на ось z .

16.19. Установлено, что в реакции $\pi^- + d \rightarrow n + n$ захват медленного π^- -мезона (его спин $J_\pi = 0$) происходит из основного состояния мезодейтерия с сохранением четности.

*) Во всех задачах данного параграфа, если нет специальной оговорки, предполагается, что в рассматриваемых процессах сохраняются четность и изотопический спин.

**) Изотопическая инвариантность предполагает, что все частицы, относящиеся к одному и тому же изотопическому мультиплету (например, протон и нейтрон, π^+ , π^0 , π^- и т. д.), имеют одинаковые спин J и внутреннюю четность P .

Учитывая, что внутренние четности протона и нейтрона одинаковы и квантовые числа дейтрона $J_d^P = 1^+$, найти внутреннюю четность π^- -мезона.

16.20. Какова внутренняя четность частицы τ , имеющей спин $J_\tau = 0$, если возможен ее распад на три π -мезона: $\tau \rightarrow 3\pi$ (внутренние четности пионов — отрицательные)?

Может ли такая частица распадаться с сохранением четности на два пиона?

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

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

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

в) распад происходит с несохранением четности.

Предполагается, что спиновое состояние распадного нуклона не фиксируется.

16.22. Известно, что в распадах частиц A и B вида $A \rightarrow 2\pi$, $B \rightarrow \pi N$ четность не сохраняется.

Можно ли результат о несохранении четности в указанных распадах получить непосредственно из анализа угловых распределений продуктов распада? Считать распадающиеся частицы поляризованными, так что среднее значение их вектора спина отлично от нуля.

16.23. Показать, что векторы поляризации γ -квантов, образующихся в распаде псевдоскалярной частицы ($J^P = 0^-$) на два γ -кванта (например, $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$), взаимно ортогональны, а в случае распада скалярной частицы ($J^P = 0^+$) — параллельны.

16.24. При столкновении пиона с покоящимся нуклоном в реакции $\pi + N \rightarrow \pi + B$ образуется нестабильная частица B , спин которой $J_B \gg 1$.

Найти угловое распределение продуктов распада такой частицы $B \rightarrow \pi N$ (в ее системе покоя) в случае, когда специально отбираются такие события реакции $\pi N \rightarrow \pi B$, в которых импульс частицы B направлен по или против направления импульса налетающего пиона.

Указание. В силу условия $J_B \gg 1$ в рассматриваемой задаче можно пренебречь спином нуклона (считать его равным нулю).

16.25. Заряды (в единицах заряда протона e) различных частиц, входящих в один и тот же изотопический мультиплет, в общем случае следующим образом выражаются через значение компоненты изоспина T_3 , соответствующее данной частице:

$$q = \frac{Y}{2} + T_3,$$

где Y — так называемый гиперзаряд (так, для нуклона $Y = 1$, для пиона $Y = 0$ и т. д.).

Показать, что сохранение изотопического спина автоматически влечет за собой и сохранение гиперзаряда.

16.26. Найти наиболее общий вид изотопически-инвариантного оператора взаимодействия пиона с нуклоном.

Как операторы πN -взаимодействия в состояниях с определенным значением изоспина O ($T = 1/2, 3/2$) связаны с найденным оператором O ?

Выразить оператор O через операторы $O(T)$.

16.27. То же, что и в предыдущей задаче, для системы из двух пионов.

Выразить оператор O через операторы $\pi\pi$ -взаимодействия в состояниях с определенным значением изоспина O ($T = 0, 1, 2$).

16.28. Для двухпионной системы указать изотопическую структуру оператора кулоновского взаимодействия пионов.

16.29. То же, что и в предыдущей задаче, для кулоновского взаимодействия в πN -системе.

16.30. Изотопическая инвариантность предполагает, что различные частицы, относящиеся к одному и тому же изотопическому мультиплету, следует рассматривать как тождественные частицы, находящиеся в различных состояниях, отличающихся значением T_3 -компоненты изоспина (и соответственно заряда). При этом квантовомеханический принцип неразличимости тождественных частиц, требующий определенной симметрии волновой функции по отношению к перестановке переменных любых двух таких частиц, должен быть распространен и на различные частицы одного и того же изомультиплета.

Выяснить, какие при этом возникают ограничения на возможные значения суммарного изотопического спина двухпионной системы в состояниях с определенным значением L орбитального момента относительного движения.

16.31. Для системы, состоящей из двух π^0 -мезонов, найти вероятности $\psi(T)$ различных значений суммарного изотопического спина системы T и среднее значение $\overline{T^2}$.

Указание. Воспользоваться результатами 3.37 и 3.39.

16.32. Найти вероятности $\psi(T)$ различных значений суммарного изотопического спина T пион-нуклонной системы и среднее значение $\overline{T^2}$ в следующих изотопических состояниях:

$$\pi^+p, \pi^+n, \pi^0p, \pi^0n, \pi^-p, \pi^-n.$$

Указание. Воспользоваться результатом 3.37.

16.33. Нейтральная частица f^0 с изотопическим спином $T = 0$ распадается на два пиона: $f^0 \rightarrow 2\pi$. Возможные каналы распада: $f^0 \rightarrow \pi^+\pi^-$, $f^0 \rightarrow 2\pi^0$.

Найти соотношение между вероятностями распада частицы f^0 по указанным каналам.

16.34. Показать, что изоспиновая часть волновой функции системы из трех пионов в состоянии с полным изотопическим спи-

ном системы $T(3\pi) = 0$ имеет определенную симметрию по отношению к перестановке изоспиновых переменных любых двух пионов, и выяснить характер этой симметрии.

На основании полученного результата показать, что нейтральная частица ω^0 с изотопическим спином $T = 0$ не может распадаться на три π^0 -мезона, т. е. распад $\omega^0 \rightarrow 3\pi^0$ запрещен.

16.35. Частица Δ , имеющая изотопический спин $T = 3/2$ и зарядовые состояния Δ^{++} , Δ^+ , Δ^0 , Δ^- , отвечающие соответственно значениям $+3/2$, $+1/2$, $-1/2$, $-3/2$ проекции T_3 изоспина, распадается на пион и нуклон: $\Delta \rightarrow \pi N$.

Указать возможные каналы распада для различных зарядовых состояний Δ и найти соотношения между вероятностями распадов по этим каналам.

16.36. То же, что и в предыдущей задаче, для частицы N^* , имеющей изотопический спин $T = 1/2$, зарядовые состояния $N^{*+}(T_3 = 1/2)$, $N^{*0}(T_3 = -1/2)$ и распадающейся на пион и нуклон: $N^* \rightarrow \pi N$.

16.37. Показать, что

$$\frac{d\sigma(p + p \rightarrow d + \pi^+)}{d\sigma(n + p \rightarrow d + \pi^0)} = 2,$$

где $d\sigma$ — дифференциальные сечения соответствующих реакций, взятые при одних и тех же относительных энергиях, углах разлета и взаимных ориентациях спинов.

16.38. Показать, что

$$\frac{d\sigma(p + d \rightarrow d + n + \pi^+)}{d\sigma(p + d \rightarrow d + p + \pi^0)} = 2,$$

где смысл $d\sigma$ такой же, как и в предыдущей задаче.

16.39. Предполагая, что рассеяние пионов нуклонами происходит главным образом через промежуточное состояние πN -системы с полным изотопическим спином $T = 3/2$ (при этом взаимодействие в состоянии с $T = 1/2$ пренебрежимо мало), найти при одинаковых относительных энергиях, углах разлета и ориентациях спинов соотношения между дифференциальными сечениями следующих трех реакций:

(I) $\pi^+ + p \rightarrow \pi^+ + p$,

(II) $\pi^- + p \rightarrow \pi^0 + p$,

(III) $\pi^- + p \rightarrow \pi^- + p$.

16.40. Основываясь на зарядовой симметрии нуклон-нуклонных и пион-нуклонных взаимодействий, найти соотношения между дифференциальными сечениями процессов

$$p + p \rightarrow p + p + \pi^-, \quad n + p \rightarrow n + p + \pi^+.$$

РЕШЕНИЯ

Глава I

ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

1.1. Операторы I , \hat{T}_a , \hat{M}_c — линейные, \hat{K} — нелинейный.

Все указанные операторы совпадают со своими комплексно сопряженными, т. е. являются действительными: $I^* = I$ и т. д.

Вид оператора \tilde{M}_c следует из цепочки равенств

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \hat{M}_c \Phi(x) dx &\equiv \int \Psi^*(x) \sqrt{c} \Phi(cx) dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{c}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x/c) \Phi(x) dx \equiv \int (\tilde{M}_c \Psi^*(x)) \Phi(x) dx, \end{aligned}$$

т. е. $\tilde{M}_c \Psi^*(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{c}} \Psi^*(x/c) = \hat{M}_{1/c} \Psi^*(x)$, или $\tilde{M}_c = \hat{M}_{1/c}$. Соответственно $\hat{M}_c^+ \equiv \tilde{M}_c^* = \hat{M}_{1/c}$.

Аналогично находим: $\hat{I}^+ = \tilde{I} = \hat{I}$, $\hat{T}_a = \hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$.

Так как оператор \hat{K} нелинейный, то понятия операторов \hat{K} и \hat{K}^+ к нему не применимы (такие операторы не существуют).

Все приведенные операторы имеют обратные: $\hat{I}^{-1} = \hat{I}$, $\hat{K}^{-1} = \hat{K}$, $\hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a}$, $\hat{M}_c^{-1} = \hat{M}_{1/c}$.

1.2. При отыскании вида операторов \tilde{f} и \hat{f}^+ из соотношений

$$\int \Phi^* \hat{f} \Psi d\tau = \int (\tilde{f} \Phi^*) \Psi d\tau = \int (\hat{f}^+ \Phi)^* \Psi d\tau \quad (1)$$

следует иметь в виду, что произвольные функции Ψ и Φ в (1) удовлетворяют некоторым ограничениям. В частности,

$$\int |\Psi|^2 d\tau < \infty, \quad \int |\Phi|^2 d\tau < \infty, \quad (2)$$

что накладывает, например, ограничения на их убывание при $r \rightarrow \infty$.

а) Из равенств $(id/dx)^* = -id/dx$ и

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) \left(i \frac{d}{dx} \Psi(x) \right) dx &= i \Phi^* \Psi \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} - i \int \left(\frac{d}{dx} \Phi^* \right) \Psi dx = \\ &= -i \int \left(\frac{d}{dx} \Phi^* \right) \Psi dx \equiv \int \left(i \frac{d}{dx} \Phi^* \right) \Psi dx \end{aligned}$$

имеем $i \frac{d}{dx} = -i \frac{d}{dx}$ и $\left(i \frac{d}{dx} \right)^+ = i \frac{d}{dx}$, т. е. оператор id/dx эрмитов.

б) При отыскании $i\partial/\partial r$ необходимо учесть, что $d\tau \equiv r^2 dr d\Omega \equiv dV$, так что

$$\begin{aligned} \int \Phi^* \left(\frac{\partial}{\partial r} \Psi \right) r^2 dr d\Omega &= \int (\Phi^* \Psi r^2) \Big|_{r=0}^{r=\infty} d\Omega - \int \left\{ \left(\frac{2}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \Phi^* \right\} \Psi dV = \\ &= - \int \left\{ \left(\frac{2}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \Phi^* \right\} \Psi dV \equiv \int \left(\frac{\partial}{\partial r} \Phi^* \right) \Psi dV, \quad (3) \end{aligned}$$

т. е. $\frac{\partial}{\partial r} = -\frac{2}{r} - \frac{\partial}{\partial r}$. Таким образом, $\left(i \frac{\partial}{\partial r} \right)^* = -i \frac{\partial}{\partial r}$, $\left(i \frac{\partial}{\partial r} \right)^+ = i \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2i}{r}$ — оператор $i\partial/\partial r$ не является эрмитовым. Отметим, что в (3) мы положили $\Phi^* \Psi r^2 \Big|_0^\infty = 0$, как это следует из условий существования интегралов (1), (2) при $\hat{f} = \partial/\partial r$.

1.3. При доказательстве следует учесть свойства $(\hat{L}^*)^* = \hat{L}$, $\tilde{\tilde{L}} = \hat{L}$, $\tilde{\tilde{A}\hat{B}} = \tilde{\tilde{B}\hat{A}}$, вытекающие из определения операций комплексного сопряжения и транспонирования операторов.

$$1.4. \tilde{\tilde{G}} = \tilde{\tilde{A}\hat{C}\hat{A}^+} = \tilde{\tilde{A}^+ \tilde{\tilde{C}} \tilde{\tilde{A}}}, \tilde{\tilde{G}}^+ \equiv \tilde{\tilde{G}}^* = (\hat{A}^+)^+ \hat{C}^+ \hat{A}^+ = \hat{A}\hat{C}\hat{A}^+ = \hat{G}.$$

$$1.5. \hat{A} = \frac{\hat{F} + \hat{F}^+}{2}, \hat{B} = \frac{\hat{F} - \hat{F}^+}{2i}.$$

1.6. Проверяется непосредственным вычислением.

1.7. Представим \hat{F} в виде $\hat{F} = \hat{A} + i\hat{B}$, где \hat{A} , \hat{B} — эрмитовы операторы (см. 1.5); $\hat{F}^2 = \hat{A}^2 - \hat{B}^2 + i(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$. Если $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$, т. е. операторы \hat{A} и $i\hat{B}$ — эрмитова и антиэрмитова части оператора \hat{F} — антикоммутируют, то \hat{F}^2 — эрмитов оператор.

$$1.8. \left[\sum_i \hat{A}_i, \sum_k \hat{B}_k \right] = \sum_i \hat{A}_i \sum_k \hat{B}_k - \sum_k \hat{B}_k \sum_i \hat{A}_i = \sum_{i,k} [\hat{A}_i, \hat{B}_k].$$

1.9. Искомое соотношение вытекает из цепочки равенств $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$.

$$\text{Аналогично можно получить } [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}].$$

1.10. Тожество проверяется непосредственным вычислением.

1.11. Нет, не могут. Условие $[\hat{P}, \hat{Q}] = -iI$ означает

$$\sum_{k=1}^N (P_{nk}Q_{km} - Q_{nk}P_{km}) = -i\delta_{nm}. \quad (1)$$

Возьмем след матриц в правой и левой частях равенства (1). Учитывая, что $\text{Sp}(\hat{P}\hat{Q}) = \text{Sp}(\hat{Q}\hat{P})$, $\text{Sp} \hat{I} = N$, находим, что соотношение (1) противоречиво и не может быть реализовано матрицами конечного ранга. Матрица, являющаяся коммутатором двух произвольных матриц конечного ранга, имеет равный нулю след.

Читателю предлагается самостоятельно обсудить вопрос о том, почему это утверждение теряет силу в случае матриц бесконечного ранга.

1.12. а) Учитывая, что $I^2 = 1$, находим

$$\exp(i\pi I) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\pi I)^n = \cos \pi + iI \sin \pi = -1.$$

б) Представив оператор \hat{T}_a в виде ряда, получаем

$$\hat{T}_a \Psi(x) = \sum_n \frac{a^n}{n!} \left(\frac{d}{dx}\right)^n \Psi(x) = \sum_n \frac{a^n}{n!} \Psi^{(n)}(x) = \Psi(x + a). \quad (1)$$

Последнее равенство в соотношениях (1) является разложением функции в ряд Тейлора. Таким образом, оператор $\hat{T}_a = \exp(ad/dx)$ является оператором сдвига, тождественным введенному в 1.1.

1.13. Представим искомое разложение в виде

$$(\hat{A} - \lambda \hat{B})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \hat{C}_n. \quad (1)$$

Подействуем на обе части (1) слева оператором $(\hat{A} - \lambda \hat{B})$:

$$1 = (\hat{A} - \lambda \hat{B}) \sum_n \lambda^n \hat{C}_n. \quad (2)$$

Приравнивая члены при одинаковых степенях λ в (2), находим

$$\hat{A}\hat{C}_{n+1} = \hat{B}\hat{C}_n, \quad \hat{C}_{n+1} = \hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{C}_n, \quad \hat{C}_0 = \hat{A}^{-1}.$$

Таким образом, имеем

$$\frac{1}{\hat{A} - \lambda \hat{B}} = \hat{A}^{-1} + \lambda \hat{A}^{-1} \hat{B} \hat{A}^{-1} + \dots = \hat{A}^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n (\hat{B} \hat{A}^{-1})^n.$$

1.14. Продифференцируем по λ оператор вида $\hat{f}(\lambda) = e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}}$:

$$\frac{d\hat{f}}{d\lambda} = \hat{A} e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}} - e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} \hat{A} e^{-\lambda \hat{A}} = e^{\lambda \hat{A}} [\hat{A}, \hat{B}] e^{-\lambda \hat{A}}.$$

Аналогично находим производные второго и более высоких порядков:

$$\frac{d^2 f}{d\lambda^2} = e^{\lambda \hat{A}} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] e^{-\lambda \hat{A}} \text{ и т. д.}$$

Окончательно:

$$\begin{aligned} e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} &= \hat{f}(\lambda=1) = \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{d^n \hat{f}}{d\lambda^n} \right)_{\lambda=0} = \\ &= \hat{B} + \frac{1}{1!} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \end{aligned}$$

1.15. $L^*(\xi, \xi') = [L(\xi, \xi')]^*$, $\tilde{L}(\xi, \xi') = L(\xi', \xi)$, $L^+(\xi, \xi') = L^*(\xi', \xi)$.
Представив действие \hat{M}_c на функцию $\Psi(x)$ в виде

$$\hat{M}_c \Psi(x) = \sqrt{c} \Psi(cx) = \sqrt{c} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(cx - x') \Psi(x') dx',$$

находим $M_c(x, x') = \sqrt{c} \delta(cx - x')$. Аналогично:

$$I(x, x') = \delta(x + x'); \quad T_a(x, x') = \delta(x - x' + a);$$

$$X(x, x') = x\delta(x - x') \text{ — ядро оператора } \hat{x} \equiv x;$$

$$P(x, x') = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \text{ — ядро оператора } \hat{p} \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}.$$

1.16. Учитывая, что ядра операторов L и L^+ связаны соотношением $L^+(x, x') = [L(x', x)]^*$, находим из равенства $L = L^+$:

- а) $f(x)$ — вещественная функция переменной x ;
- б) вещественная часть $f(x)$ является четной функцией x , а мнимая часть — нечетной функцией;
- в) $f(x) = cg^*(x)$, где c — вещественное число.

1.17. Учитывая вид ядра оператора $C = \hat{A}\hat{B}$

$$C(x, x') = \int A(x, x'') B(x'', x') dx'' \quad (1)$$

и вид ядра $X(x, x') = x\delta(x - x')$ оператора \hat{x} , находим из условия $F\hat{x} - \hat{x}F = 0$

$$\begin{aligned} \int \{F(x, x'') x'' \delta(x'' - x') - x\delta(x - x'') F(x'', x')\} dx'' = \\ = (x' - x) F(x, x') = 0. \quad (2) \end{aligned}$$

Из (2) вытекает вид ядра $F(x, x')$:

$$F(x, x') = f(x) \delta(x - x'), \quad (3)$$

где $f(x)$ — произвольная функция.

Аналогично, из условия $G\hat{p} - \hat{p}G = 0$ и вида ядра $P(x, x') = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x')$ следует после простых преобразований

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x'} \right) G(x, x') = 0,$$

т. е. $G(x, x')$ является функцией вида $G(x, x') \equiv g(x - x')$.

1.18. Из условия $[F, \hat{x}] = 0$ вытекает (см. предыдущую задачу)

$$F(x, x') = f(x) \delta(x - x'), \quad (1)$$

из условия $[\hat{F}, \hat{p}] = 0$ следует

$$F(x, x') = g(x - x'). \quad (2)$$

Соотношения (1) и (2) одновременно могут иметь место лишь при условии $f(x) = F_0 = \text{const}$; при этом $F(x, x') = F_0 \delta(x - x')$. Оператор с таким ядром имеет вид $F \equiv F_0$.

1.19. Нормировка в. ф. на единицу дает $|C| = (\pi a^2)^{-1/4}$. Используя квантовомеханическую формулу для средних значений, находим

$$\begin{aligned} \bar{x} &= x_0, & \overline{x^2} &= a^2/2 + x_0^2, & \overline{(\Delta x)^2} &= \overline{x^2} - \bar{x}^2 = a^2/2, \\ \bar{p} &= p_0, & \overline{p^2} &= p_0^2 + \hbar^2/2a^2, & \overline{(\Delta p)^2} &= \hbar^2/2a^2. \end{aligned}$$

1.20. При $|C|^{-2} = \int \varphi^2(x) dx$ в. ф. нормирована на единицу и $\bar{p} = \int \Psi^* \hat{p} \Psi dx = -i\hbar |C|^2 \int \left\{ \varphi(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} + i \frac{p_0}{\hbar} \varphi^2(x) \right\} dx = |C|^2 p_0 \int \varphi^2(x) dx = p_0$.

1.21. Средний дипольный момент системы равен

$$\bar{\mathbf{d}} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \sum_{a=1}^n e_a \mathbf{r}_a \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \prod_{b=1}^n d^3 r_b. \quad (1)$$

Сделаем в (1) замену переменной $\mathbf{r}_a \rightarrow \mathbf{r}'_a = -\mathbf{r}_a$:

$$\bar{\mathbf{d}} = - \int_{-\infty}^{\infty} \sum_a e_a \mathbf{r}'_a |\Psi(-\mathbf{r}'_1, \dots, -\mathbf{r}'_n)|^2 \prod_b d^3 r'_b. \quad (2)$$

Учитывая, что согласно условию задачи

$$\Psi(-\mathbf{r}_1, \dots, -\mathbf{r}_n) = I \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n),$$

где $I = \pm 1$ — четность состояния системы, находим из (1) и (2), $\bar{\mathbf{d}} = -\bar{\mathbf{d}}$, т. е. $\bar{\mathbf{d}} = 0$.

$$1.22. \overline{\widehat{L}\widehat{L}^+} = \int \Psi^* \widehat{L}\widehat{L}^+ \Psi d\tau = \int (\widehat{L}^+ \Psi)^* \widehat{L}^+ \Psi d\tau \geq 0.$$

$$\text{Аналогично } \overline{\widehat{L}^+ \widehat{L}} = \int |\widehat{L}\Psi|^2 d\tau \geq 0.$$

1.23. Так как $\hat{f}^+ = \hat{f}$, то, согласно предыдущей задаче, в произвольном состоянии системы $\overline{\hat{f}^2} \geq 0$, в том числе и в состоянии, отвечающем минимальному значению величины \hat{f}^2 ; но в последнем случае $\overline{\hat{f}^2} = (\hat{f}^2)_{\min} \geq 0$.

1.24. $\hat{f}_i^2 = cf_i$, т. е. спектр с. з. величины \hat{f} состоит из двух значений: $f_1 = 0$, $f_2 = c$.

1.25. Уравнение для с. ф. и с. з. оператора \hat{f} и его решение:

$$-i\tilde{\alpha} \frac{d}{dx} \Psi_f(x) + \beta x \Psi_f(x) = \hat{f} \Psi_f(x), \quad (1)$$

$$\Psi_f(x) = C \exp \left\{ -\frac{i(\beta x - \hat{f})^2}{2\tilde{\alpha}\beta} \right\} \quad (2)$$

($\tilde{\alpha} = \alpha\hbar$). Из (2) следует, что с. з. \hat{f} — произвольные вещественные числа, спектр — непрерывный и с. з. — невырожденные.

Выбор коэффициента C в (2) из условия нормировки $\int \Psi_f^*(x) \Psi_f(x) dx = \delta(f - f')$ приводит к значению $|C| = (2\pi\tilde{\alpha})^{-1/2}$

Убедиться в полноте системы функций (2) и рассмотреть предельные случаи $\alpha \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ предоставляется читателю самостоятельно.

$$1.26. \text{Уравнение для с. ф. и с. з. } \hat{f}(x) \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}^*(x) \Psi(x) dx = \hat{f} \Psi(x)$$

имеет следующие решения:

а) имеется одна с. ф. $\Psi_0 = cf(x)$, отвечающая с. з., равному $f_0 = \int |f(x)|^2 dx > 0$; б) все другие с. з. оператора равны нулю. Им отвечают с. ф. $\Psi_i(x)$, обладающие свойством $\int \hat{f}^*(x) \Psi_i(x) dx = 0$, т. е., как и должно быть, эти функции ортогональны к функции $\Psi_0 = f(x)$. Очевидно, что число таких функций бесконечно, т. е. с. з. $f_1 = 0$ имеет бесконечную кратность вырождения.

1.27. Подействовав оператором \hat{G} , равным

$$\hat{G} = \prod_{i=1}^N (\hat{f} - f_i) = (\hat{f} - f_1)(\hat{f} - f_2) \dots (\hat{f} - f_N), \quad (1)$$

на произвольную функцию Ψ , получим $\hat{G}\Psi = 0$, так как произвольную функцию можно представить в виде ряда по с. ф. Ψ_k оператора \hat{f} : $\Psi = \sum c_k \Psi_k$ (с. ф. эрмитова оператора образуют полную систему), а $(\hat{f} - f_k)\Psi_k = 0$. Итак, $\hat{G} \equiv 0$, и, учитывая

(1), находим

$$f^N - \sum_{i=1}^N f_i f^{N-1} + \frac{1}{2} \sum_{i, k; i \neq k} f_i f_k f^{N-2} + \dots + (-1)^N \prod_{i=1}^N f_i = 0, \quad (2)$$

т. е. оператор f^N линейно выражается через операторы \hat{I} , f , ..., f^{N-1} .

В частности, при $N = 2$ из (2) следует

$$f^2 = (f_1 + f_2) f - f_1 f_2. \quad (3)$$

В случае оператора I имеем $I_1 = -I_2 = 1$ и из (3) вытекает $f^2 = 1$.

При $N = 3$ и с. з., равных $f_1 = 0$ и $f_2 = -f_3 \equiv f_0$, из (2) вытекает

$$f^3 = f_0^2 f. \quad (4)$$

1.28. Продифференцируем по λ обе части уравнения для с. ф.:

$$f(\lambda) \Psi_n(\lambda) = f_n(\lambda) \Psi_n(\lambda), \quad (1)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \lambda} \right) \Psi_n(\lambda) + f \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n(\lambda) = \frac{\partial f_n}{\partial \lambda} \Psi_n(\lambda) + f_n \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n(\lambda). \quad (2)$$

Умножим обе части (2) слева на Ψ_n^* и проинтегрируем по координатам q , от которых зависят функции $\Psi_n(\lambda, q)$. Учитывая равенство

$$\int \Psi_n^* f \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n d\tau_q = \int (f \Psi_n)^* \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n d\tau_q = f_n \int \Psi_n^* \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi_n d\tau_q,$$

вытекающее из эрмитовости оператора f , получаем искомое соотношение.

1.29. Из операторного равенства $\hat{A}\mathcal{L} - \mathcal{L}\hat{A} = 0$, примененного к с. ф. Ψ_{L_i} оператора \mathcal{L} (L_i — с. з.), следует, что функция $\hat{A}\Psi_{L_i}$ также является с. ф. \mathcal{L} , отвечающей тому же с. з. L_i . Если с. з. L_i является невырожденным, то $\hat{A}\Psi_{L_i} = A_i\Psi_{L_i}$. Точно так же в этом случае Ψ_{L_i} является с. ф. оператора \mathcal{B} , т. е. $\hat{B}\Psi_{L_i} = B_i\Psi_{L_i}$. Если бы все с. з. L_i были невырожденные, то во всех состояниях Ψ_{L_i} ($i = 1, 2, \dots$) имело бы место соотношение

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi_{L_i} = (A_i B_i - B_i A_i)\Psi_{L_i} = 0. \quad (1)$$

Равенство (1), справедливое для всех с. ф. Ψ_{L_i} , образующих полную систему, означает $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, что противоречит условию задачи. Таким образом, среди с. з. L_i обязательно есть вырожденные.

30. Рассмотрим интеграл

$$J = \int |(\alpha \hat{A}_1 - i \hat{B}_1) \Psi|^2 d\tau, \quad (1)$$

где $\hat{A}_1 = \hat{A} - a$, $\hat{B}_1 = \hat{B} - b$; α , a , b — вещественные параметры.

В силу неотрицательности подынтегральной функции имеем при всех α

$$J(\alpha) \geq 0. \quad (2)$$

Перепишав (1) в виде

$$J = \int (\alpha \hat{A}_1^* + i \hat{B}_1^*) \Psi^* \cdot (\alpha \hat{A}_1 - i \hat{B}_1) \Psi d\tau,$$

используя эрмитовость операторов \hat{A}_1 и \hat{B}_1 , а также определение среднего (в. ф. предполагается нормированной на единицу), имеем

$$\begin{aligned} J &= \int \Psi^* (\alpha \hat{A}_1 + i \hat{B}_1) (\alpha \hat{A}_1 - i \hat{B}_1) \Psi d\tau = \\ &= \int \Psi^* (\alpha^2 \hat{A}_1^2 - i\alpha [\hat{A}_1, \hat{B}_1] + \hat{B}_1^2) \Psi d\tau = \\ &= \alpha^2 \overline{\hat{A}_1^2} - i\alpha \overline{[\hat{A}_1, \hat{B}_1]} + \overline{\hat{B}_1^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Учитывая, что $[\hat{A}_1, \hat{B}_1] = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, имеем из (2), (3)

$$\alpha^2 \overline{(\hat{A} - a)^2} + \alpha \overline{\hat{C}} + \overline{(\hat{B} - b)^2} \geq 0. \quad (4)$$

Условие положительности квадратного трехчлена (4) по α требует

$$\overline{(\hat{A} - a)^2} \cdot \overline{(\hat{B} - b)^2} \geq \overline{\hat{C}}^2/4. \quad (5)$$

Выбрав в (5) $a = \bar{A}$, $b = \bar{B}$, приходим к утверждению задачи.

Случай равенства в (5) реализуется, как это следует из (1) и (4), при выполнении условия $(\alpha \hat{A}_1 - i \hat{B}_1) \Psi = 0$. В частности, для операторов $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$, $\hat{C} = \hbar$ это условие принимает

$$\left(\alpha x - \hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi = f \Psi \quad (6)$$

($f = \alpha a - ib$ — произвольная комплексная величина). Решение уравнения (6) ($\alpha < 0$)

$$\Psi = C_0 \exp \left[\frac{(\alpha x - f)^2}{2\alpha \hbar} \right] \equiv \tilde{C}_0 \exp \left[\frac{i p_0 x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{2a^2} \right]$$

представляет явный вид в. ф., минимизирующей соотношение неопределенности для операторов координаты и импульса.

Необходимо подчеркнуть, что при приложениях формулы (5) следует соблюдать осторожность. Это видно, например, уже из результата ее применения к случаю операторов $\hat{A} = \hat{l}_z \equiv -i\hbar \frac{d}{d\varphi}$

и $B = \hat{\varphi} \equiv \varphi$ (для которых $[\hat{l}_z, \hat{\varphi}] = -i$, так что $C = -1$):

$$\overline{(\Delta l_z)^2} \cdot \overline{(\Delta \varphi)^2} \geq 1/4,$$

физическая бессмысленность которого очевидна, так как $\overline{(\Delta l_z)^2}$ может принимать произвольные значения (в том числе и быть равным нулю), а величина $\overline{(\Delta \varphi)^2}$ во всяком случае не превосходит π^2 .

Дело в том, что соотношение, определяющее эрмитов оператор \hat{f} (которое существенно использовалось при переходе от выражения (1) к (3)):

$$\int \Psi_2^* \hat{f} \Psi_1 d\tau = \int (\hat{f} \Psi_2)^* \Psi_1 d\tau, \quad (7)$$

вообще говоря, не выполняется тождественно, а справедливо лишь для *определенного класса* функций, входящих, как говорят, в область определения оператора \hat{f} как эрмитова оператора. Так, для оператора $\hat{l}_z = -id/d\varphi$ в общем случае имеем вместо (7) соотношение

$$\int_0^{2\pi} \Psi_2^* \left(-i \frac{d}{d\varphi} \Psi_1\right) d\varphi = \int_0^{2\pi} \left(-i \frac{d}{d\varphi} \Psi_2\right)^* \Psi_1 d\varphi - i \Psi_2^* \Psi_1 \Big|_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}. \quad (8)$$

Соответственно для *всех* функций $\Psi_{1,2}(\varphi)$, входящих в область определения оператора $-id/d\varphi$ как эрмитова, должно быть выполнено условие

$$\Psi_2^* \Psi_1 \Big|_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \equiv \Psi_2^*(2\pi) \Psi_1(2\pi) - \Psi_2^*(0) \Psi_1(0) = 0, \quad (9)$$

т. е.

$$\frac{\Psi_1(2\pi)}{\Psi_1(0)} = \left(\frac{\Psi_2(0)}{\Psi_2(2\pi)}\right)^* = \text{const} \quad (9')$$

или $\Psi_{1,2}(0) = \Psi_{1,2}(2\pi) = 0$, причем, как легко сообразить,

$$\text{const} \equiv \exp(i\beta), \quad \beta - \text{вещественное число} \quad (9'')$$

(при этом различным значениям β соответствуют различные же реализации оператора $-id/d\varphi$ как эрмитова). Имея в виду физическую интерпретацию оператора $\hat{l}_z = -id/d\varphi$ как оператора проекции момента и, соответственно, физическое условие тождественности точек $\varphi = 0$ и $\varphi = 2\pi$, требующее выполнения равенства $\Psi(0) = \Psi(2\pi)$ для в. ф., принимаем $\beta = 0$.

Уточнив деталь, связанную с важной ролью области определения в понятии эрмитова оператора, вернемся к выводу соотношения (5). Легко заметить, что справедливость формулы (5) определяется только возможностью использования соотношений

$$\begin{aligned} \int \Psi^* \hat{A}^2 \Psi d\tau &= \int (\hat{A}\Psi)^* (\hat{A}\Psi) d\tau, \\ \int \Psi^* \hat{A}\hat{B}\Psi d\tau &= \int (\hat{A}\Psi)^* (\hat{B}\Psi) d\tau \end{aligned} \quad (10)$$

и аналогичных им, получающихся в результате взаимной перестановки операторов \hat{A} и \hat{B} . Формальное обоснование этих соотношений состояло в ссылке на эрмитовость операторов. Теперь же, имея в виду сказанное выше об области определения оператора как эрмитова, замечаем, что возможность использования соотношений (10) предполагает, что не только в.ф. Ψ , но также и функции $\hat{A}\Psi$ и $\hat{B}\Psi$ принадлежат областям определения операторов \hat{A} и \hat{B} как эрмитовых.

В физических приложениях в.ф. Ψ относится к области определения рассматриваемых операторов как эрмитовых; однако для функций $\hat{A}\Psi$ и $\hat{B}\Psi$ аналогичное утверждение может быть несправедливым, и в этом случае соотношение (5) теряет силу. В этом смысле в случае операторов \hat{x} и \hat{p}_x не возникает никаких ограничений при использовании соотношений (10).

В случае же операторов \hat{l}_z и $\hat{\phi}$ ситуация иная, и соотношение (5) для них в общем случае неприменимо. Формально это связано с тем, что для в.ф. $\Psi(\varphi)$, входящей в область определения оператора $-i d/d\varphi$ как эрмитова (и тем самым удовлетворяющей условию $\Psi(0) = \Psi(2\pi)$), функция $\hat{\phi}\Psi \equiv \varphi\Psi(\varphi)$ таковой уже не является, и поэтому

$$\int_0^{2\pi} \Psi^* \hat{l}_z \hat{\phi} \Psi d\varphi \neq \int_0^{2\pi} (\hat{l}_z \Psi)^* \hat{\phi} \Psi d\varphi.$$

Однако в рассматриваемом случае довольно просто учесть возникающее осложнение и получить соотношение, являющееся обобщением (5).

Действительно, полагая в (1) $\hat{A} = \hat{l}_z$, $\hat{B} = \hat{\phi}$, (так что $\hat{C} = -1$), сразу выбрав $a = \bar{l}_z$, $b = \bar{\phi}$, и учитывая соотношение

$$\int_0^{2\pi} (\hat{l}_z \Psi)^* \hat{\phi} \Psi d\varphi = \int_0^{2\pi} \Psi^* \hat{l}_z \hat{\phi} \Psi d\varphi + 2\pi i |\Psi(2\pi)|^2,$$

легко находим *)

$$J = \alpha^2 (\bar{l}_z^2 - \bar{l}_z^2) - \alpha (1 - 2\pi |\Psi(2\pi)|^2) + (\bar{\phi}^2 - \bar{\phi}^2) \geq 0 \quad (11)$$

(подчеркнем, что использовано условие нормировки $\int_0^{2\pi} |\Psi|^2 d\varphi = 1$).

Из (11) следует соотношение неопределенности для \hat{l}_z и $\hat{\phi}$:

$$\overline{(\Delta l_z)^2} \cdot \overline{(\Delta \phi)^2} \geq \frac{1}{4} (1 - 2\pi |\Psi(2\pi)|^2)^2.$$

*) $\bar{l}_z^2 = \int_0^{2\pi} \hat{l}_z \Psi^2 d\varphi.$

1.31. Ответы на поставленные вопросы, вообще говоря, неоднозначны. Некоммутативность операторов *не означает*, что отсутствуют такие состояния, в которых соответствующие физические величины имеют одновременно определенные значения. Строгое утверждение: в. ф. таких состояний, если они и есть, не образуют полной системы. Пример: операторы компонент момента не коммутируют друг с другом, но в состоянии с моментом $L=0$ все компоненты момента имеют определенное значение $L_i=0$. См. также 1.33.

Если операторы коммутируют, то это *не означает*, что если A имеет определенное значение, то и B — тоже. Строгое утверждение: состояния, в которых A и B одновременно имеют определенные значения, существуют, и в. ф. таких состояний образуют полную систему. Пример: в случае одномерного движения операторы импульса $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ и кинетической энергии $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$ коммутируют, однако в состоянии $\Psi(x) = C \sin(p_0 x/\hbar)$ кинетическая энергия имеет определенное значение, а импульс не имеет. Если же спектр с. з. величины A является невырожденным, то любой оператор, коммутирующий с A , в состоянии Ψ_{A_i} также имеет определенное значение (см. 1.29).

1.32. $\hat{I}\hat{r}\Psi(\mathbf{r}) = \hat{I}[\mathbf{r}\Psi(\mathbf{r})] = -\mathbf{r}\Psi(-\mathbf{r}) = -\hat{r}\hat{I}\Psi(\mathbf{r})$, откуда вытекает $[\hat{I}, \hat{r}]_+ = \hat{I}\hat{r} + \hat{r}\hat{I} = 0$. Аналогично находим: $[\hat{I}, \hat{p}]_+ = 0$, $[\hat{I}, \hat{L}]_- = 0$.

1.33. $(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})\Psi_{ab} = (ab + ba)\Psi_{ab} = 2ab\Psi_{ab} = 0$. Таким образом, $ab=0$, т. е. либо a , либо b равно нулю. Пример: $\hat{x}\hat{I} + \hat{I}\hat{x} = 0$, и имеется только одна в. ф. $\Psi_0 = \delta(x)$, являющаяся с. ф. операторов \hat{x} и \hat{I} одновременно, при этом с. з. координаты $x_0 = 0$.

Отметим, что антикоммутирующие операторы могут и не иметь ни одной общей с. ф. (см. матрицы Паули, глава 5 «Спин»).

1.34. а) Решение уравнения для с. ф. и с. з. оператора $\hat{f} = x - \frac{d}{dx}$ приводит к с. ф. вида $\Psi_f = C \exp[(x-f)^2/2]$. Эти функции при любом «с. з.» f являются растущими при $x \rightarrow \pm\infty$. Такие функции исключаются из рассмотрения, так что следует считать, что оператор \hat{f} вообще не имеет с. ф.

б) Уравнение для с. ф. и его решения имеют вид

$$\hat{f}\Psi_f = \left(x + \frac{d}{dx}\right)\Psi_f = f\Psi_f, \quad \Psi_f = C \exp\left[-\frac{(x-f)^2}{2}\right]. \quad (1)$$

Из (1) следует, что с. з. f — любое комплексное число. С. ф., отвечающие различным с. з., не являются ортогональными.

Представив с.з. f в виде $f = f_1 + if_2$ ($f_{1,2}$ вещественны) и введя с.ф. $\tilde{\Psi}_f$, нормированные на единицу: $\tilde{\Psi}_f = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{if_2x - \frac{(x-f_1)^2}{2}}$, находим, что они образуют полную систему, так как

$$\frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}_f^*(x') \tilde{\Psi}_f(x) df_1 df_2 = \delta(x - x').$$

е) Решение задачи на с. ф. $\Psi_a = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ и с. з. матрицы (оператора) \hat{a}

$$\hat{a}\Psi_a = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A + iB \\ 0 \end{pmatrix} = a\Psi_a = a \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix},$$

очевидно, следующее: одно с.з. $a = 1$, ему отвечает с.ф. $\Psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$; второе с.з. $a = 0$, ему отвечает с.ф. $\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$. С.ф. Ψ_0 и Ψ_1 не ортогональны, но, очевидно, образуют полную систему.

з) Приведенный оператор (матрица) имеет только одно невырожденное с.з. $b = 0$. Соответствующая с.ф. $\Psi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ не образует, конечно, полной системы.

1.35. Представим произвольные функции Ψ и Φ в виде

$$\Psi = \sum_k a_k \Psi_{f_k}, \quad \Phi = \sum_k b_k \Psi_{f_k} \quad (1)$$

(считаем, для простоты записи, спектр с.з. f_i невырожденным).

а) Эрмитовость оператора $\hat{P}(f_i)$ следует из цепочки равенств

$$\begin{aligned} \int \Phi^* \hat{P}(f_i) \Psi d\tau &= \int \Phi^* \hat{P}(f_i) \sum_k a_k \Psi_{f_k} d\tau = a_i \int \Phi^* \Psi_{f_i} d\tau = \\ &= a_i b_i^* = \int [\hat{P}(f_i) \Phi]^* \Psi d\tau = \int [\hat{P}^+(f_i) \Phi]^* \Psi d\tau. \end{aligned} \quad (2)$$

$$\text{б) } \hat{P}(f_i) \Psi = \hat{P}(f_i) \sum_k a_k \Psi_{f_k} = a_i \Psi_{f_i}, \quad (3)$$

$$\hat{P}^2(f_i) \Psi = \hat{P}(f_i) [\hat{P}(f_i) \Psi] = a_i \hat{P}(f_i) \Psi_{f_i} = a_i \Psi_{f_i}. \quad (4)$$

Из (3) и (4) следует $\hat{P}^2(f_i) = \hat{P}(f_i)$.

Оператор $\hat{P} = 1 - \hat{P}(f_i)$ проектирует на состояния со значениями величины f , не равными f_i . Легко найти, что $\hat{P}^2 = \hat{P}$.

1.36. Физический смысл $\overline{\hat{P}(f_i)}$ становится очевидным, если представить Ψ в виде $\Psi = \sum C_k \Psi_{f_k}$ и воспользоваться формулой (2) предыдущей задачи (считаем в.ф. Ψ нормированной на

единицу):

$$\overline{P(f_i)} = \int \Psi^* \hat{P}(f_i) \Psi d\tau = |C_i|^2 \equiv |C(f_i)|^2.$$

1.37. $\hat{P}(x \geq 0) = \eta(x)$, где $\eta(x)$ — ступенчатая функция, равная

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Очевидно, $\hat{P}^2(x \geq 0) = \hat{P}(x \geq 0)$.

1.38. Произвольную функцию $\Psi(\mathbf{r})$ можно представить в виде суперпозиции функций Ψ_{\pm} , четной (+) и нечетной (-) относительно преобразования инверсии I ($I\Psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi(-\mathbf{r})$):

$$\Psi(\mathbf{r}) = [\Psi(\mathbf{r}) + \Psi(-\mathbf{r})]/2 + [\Psi(\mathbf{r}) - \Psi(-\mathbf{r})]/2.$$

По смыслу операторов \hat{P}_{\pm} должно быть $\hat{P}_{\pm}\Psi = [\Psi(\mathbf{r}) \pm \Psi(-\mathbf{r})]/2$; таким образом, $\hat{P}_+ = (1 + I)/2$, $\hat{P}_- = (1 - I)/2$.

Очевидно, $\hat{P}_{\pm}^2 = \hat{P}_{\pm}$, $\hat{P}_+ + \hat{P}_- = 1$.

1.39. Оператор \hat{P} с ядром, имеющим вид

$$P(x, x') = cf(x)f^*(x'), \quad c^{-1} = \int |f(x)|^2 dx,$$

является проекционным. Он проектирует на состояние, описываемое в. ф. $\Psi(x) \equiv f(x)$.

1.40. $\hat{P}(f_i) = \prod_{k=1}^N \frac{(f_i - f_k)}{(f_i - f_k)}$, где штрих у символа произведения

означает, что в произведении отсутствует сомножитель с k , равным i .

1.41. $\Psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, $\Psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p}_0\mathbf{r}/\hbar)$,

$$\Phi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}_0/\hbar), \quad \Phi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0).$$

1.42. $\Phi(p) = \sqrt{a^2/\hbar} C \exp\left[-\frac{i(p-p_0)x_0}{\hbar} - \frac{(p-p_0)^2 a^2}{2\hbar^2}\right]$.

1.43. Искомая вероятность равна

$$w = \int_{z_1}^{z_2} \int_{p_1}^{p_2} \int_{-\infty}^{\infty} |F(x, p_y, z)|^2 dx dp_y dz,$$

где

$$F(x, p_y, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}} \Psi(x, y, z) dy,$$

причем функция $\Psi(x, y, z)$ предполагается нормированной на единицу.

1.44. Умножим обе части соотношения $I\Psi(x) = \Psi(-x)$ слева на $\Psi_p^*(x)$ и проинтегрируем. Учитывая, что $\Psi_p(x) = \Psi_{-p}(-x)$, находим

$$\hat{I}\Phi(p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p^*(x) \hat{I}\Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{-p}^*(-x) \Psi(-x) dx = \Phi(-p),$$

т. е. $\hat{I}\Phi(p) = \Phi(-p)$.

Вид оператора сдвига $\hat{T}_a\Psi(x) = \Psi(x+a)$ в импульсном представлении легко найти, если учесть, что согласно задаче 1.12, б его можно представить в виде $\hat{T}_a = \exp\left(a \frac{d}{dx}\right) = \exp(iap/\hbar)$. Так как в импульсном представлении $\hat{p} = p$, то $\hat{T}_a = \exp(iap/\hbar)$.

1.45. Из условия $\Psi(\mathbf{r}) = I\Psi(-\mathbf{r})$, где $I = \pm 1$ — четность состояния, имеем

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{p}) &= \int \Psi_p^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) dV = I \int \Psi_p^*(\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) dV = \\ &= I \int \Psi_{-p}^*(-\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) dV = I\Phi(-\mathbf{p}) \end{aligned} \quad (1)$$

(при преобразовании (1) учтено свойство $\Psi_p(\mathbf{r}) = \Psi_{-p}(-\mathbf{r})$).

1.46.

$$\tilde{\Psi}(x) \equiv \hat{L}\Psi(x) = \int L(x, x') \Psi(x') dx'. \quad (1)$$

Подставим в (1) $\Psi(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Phi(p') \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) dp'$, умножим обе части (1) на $\Psi_p^*(x)$ слева и проинтегрируем по x . Получаем

$$\tilde{\Phi}(p) \equiv \hat{L}\Phi(p) = \int L(p, p') \Phi(p') dp', \quad (2)$$

$$L(p, p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \iint \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p'x' - px)\right] L(x, x') dx dx', \quad (3)$$

$$L(x, x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \iint \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - p'x')\right] L(p, p') dp dp'. \quad (4)$$

Обобщение (1) — (4) на трехмерный случай очевидно. Так,

$$L(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iint \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'\mathbf{r}' - \mathbf{p}\mathbf{r})\right] L(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV dV'.$$

1.47. Оператор $\hat{G} = r^{-1}$ имеет в \mathbf{r} -представлении ядро $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Ядро этого оператора в \mathbf{p} -представлении, согласно предыдущей задаче, равно

$$G(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{1}{r} \exp\left[\frac{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\mathbf{r}}{\hbar}\right] dV = [2\pi^2\hbar(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2]^{-1}. \quad (1)$$

Аналогично находим ядро оператора $\hat{G}^2 = \frac{\hat{f}}{r^2}$:

$$G^2(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = [4\pi\hbar^2 |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|]^{-1}. \quad (2)$$

При вычислении интегралов, входящих в (1), (2), учтено

$$\int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx = \pi/2, \quad \int \frac{1}{r} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) dV = 4\pi/q^2.$$

Проверить равенство $\hat{G}^2 = \hat{G} \cdot \hat{G}$, т. е.

$$G^2(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \int G(\mathbf{p}, \mathbf{p}'') G(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') d\mathbf{p}'',$$

читателю предлагается самостоятельно.

1.48. Обозначим через $\Psi_{A_n}(q)$ и $\Psi_{B_n}(q)$ с. ф. операторов \hat{A} и \hat{B} в некотором q -представлении, $\Psi(q)$ — в. ф. произвольного состояния в том же представлении. В. ф. этого произвольного состояния в A - и B -представлениях $a(A_n)$ и $b(B_n)$ определяются соотношениями вида

$$\begin{aligned} \Psi(q) &= \sum_n a(A_n) \Psi_{A_n}(q), \quad a(A_n) = \int \Psi_{A_n}^* \Psi d\tau, \\ \Psi(q) &= \sum_m b(B_m) \Psi_{B_m}(q), \quad b(B_m) = \int \Psi_{B_m}^* \Psi d\tau \end{aligned} \quad (1)$$

(для простоты ограничимся случаем, когда спектр операторов \hat{A} и \hat{B} дискретный; обобщение на случай непрерывного спектра или общий случай, когда одновременно есть и дискретный, и непрерывный спектры, представляется очевидным).

Взяв в качестве в. ф. произвольного состояния с. ф. Ψ_{B_k} , найдем вид в. ф. этого состояния в A -представлении:

$$a_{B_k}(A_n) = \int \Psi_{A_n}^*(q) \Psi_{B_k}(q) d\tau, \quad (2)$$

и аналогично получаем вид с. ф. Ψ_{A_n} в B -представлении:

$$b_{A_n}(B_k) = \int \Psi_{B_k}^*(q) \Psi_{A_n}(q) d\tau. \quad (3)$$

Из выражений (2) и (3) вытекает $a_{B_k}(A_n) = b_{A_n}^*(B_k)$.

1.49. а) $\hat{f}\Psi_i = \sum_k f_{ki}\Psi_k$; б) $\hat{f}C_i = \sum_k f_{ik}C_k$, где C_i — в. ф. произвольного состояния в λ -представлении.

1.50. $P_{nn'}(f_i) = \delta_{ni}\delta_{n'i}$, если спектр f_n дискретный. В случае непрерывного спектра $P_{f_i}(f, f') = \delta(f - f_i)\delta(f' - f_i)$.

1.51. Оператор $\hat{F} = F(f)$ следует понимать как оператор, с. ф. которого совпадают с с. ф. оператора f , а соответствующие с. з. равны $F_i = F(f_i)$. Так как система функций Ψ_f является полной (при этом существенна эрмитовость оператора f), то действие оператора \hat{F} на произвольную функцию Ψ определено:

$$\hat{\Psi} \equiv \hat{F}\Psi = \hat{F} \sum_n c(f_n) \Psi_{f_n}(q) = \sum_n c(f_n) F(f_n) \Psi_{f_n}(q). \quad (1)$$

Из (1) легко получить, что ядро $F(q, q')$ оператора \hat{F} (в q -представлении), рассматриваемого как линейный интегральный оператор, равно

$$F(q, q') = \sum_n F(f_n) \Psi_{f_n}(q) \Psi_{f_n}^*(q'),$$

где сумма берется по всем с. ф. оператора f . В f -представлении оператор \hat{F} является оператором умножения на $F(f)$.

Записав $(-\Delta)^{-1/2} = \hbar [(-i\hbar\nabla)^2]^{-1/2}$, замечаем, что оператор $(-\Delta)^{-1/2}$ с точностью до множителя является оператором $\frac{\hat{I}}{|\mathbf{p}|}$. Его вид в координатном представлении определяется ядром (сравнить с 1.47):

$$\hbar p^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = [2\pi^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2]^{-1}.$$

1.52. Так как с. ф. оператора $F(f)$ являются с. ф. оператора f и у него, как и у f , имеется N различных с. з., его можно представить в виде (см. также 1.27)

$$\hat{F} = F(\hat{f}) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \hat{f}^n \quad (\hat{f}^0 \equiv \hat{I}). \quad (1)$$

Значения c_n находятся из системы уравнений

$$F(f_i) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n f_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2)$$

В частном случае $N = 2$ система (2) принимает вид

$$F(f_1) = c_0 + c_1 f_1, \quad F(f_2) = c_0 + c_1 f_2,$$

откуда находим c_0 и c_1 и вид оператора \hat{F} согласно (1):

$$\hat{F} = \frac{f_2 F(f_1) - f_1 F(f_2)}{f_2 - f_1} + \frac{F(f_1) - F(f_2)}{f_1 - f_2} \hat{f}. \quad (3)$$

В случае $N = 3$ при указанных в условии задачи с. з. f_i коэффициенты c_n в формуле (1) равны

$$c_0 = F(0), \quad c_1 = \frac{F(f_0) - F(-f_0)}{2f_0}, \quad c_2 = \frac{F(f_0) + F(-f_0) - 2F(0)}{2f_0^2}. \quad (4)$$

1.53. Проекционный оператор имеет два с. з., равные 0 и 1. Учитывая формулу (3) предыдущей задачи, находим явный

вид F :

$$\hat{F} = F(\hat{P}) = F(0) + [F(1) - F(0)]\hat{P}.$$

1.54. Унитарными являются операторы I, \hat{T}_a, \hat{M}_c .

1.55. Из $O^2 = O$ и $OO^+ = O^+O = 1$ следует $O = 1$.

1.56. $|c| = 1$, т. е. $c = \exp(i\alpha)$, α — вещественное число.

1.57. Из $\hat{U} = \hat{U}_1\hat{U}_2$ следует $\hat{U}^+ = \hat{U}_2^+\hat{U}_1^+$, откуда $\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}_1^+\hat{U}_2 = 1$.

1.58. Из унитарности O следует $OO^+ = 1$. Если O к тому же эрмитов оператор, т. е. $O^+ = O$, то $O^2 = 1$. Эрмитов оператор, удовлетворяющий такому уравнению, имеет с.з., равные ± 1 (и только). Таким образом, эрмитов оператор, имеющий с.з., равные ± 1 , является также и унитарным. Примером такого оператора является оператор отражения I (еще один пример — матрицы Паули, см. гл. 5).

1.59. Так как $O^+ = \exp(-iF^+) = \exp(-iF)$, то $OO^+ = O^+O = 1$.

1.60. Унитарность оператора легко установить, если предварительно доказать соотношение $(L^{-1})^+ = (L^+)^{-1}$. Искомое представление оператора $O = \exp(iF)$ вытекает из преобразований

$$\exp(i\hat{F}) = \exp(i\hat{F}/2)[\exp(-i\hat{F}/2)]^{-1} = \frac{\cos(\hat{F}/2) + i \sin(\hat{F}/2)}{\cos(\hat{F}/2) - i \sin(\hat{F}/2)}.$$

1.61.

$$\begin{aligned} \hat{F}' = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^+ &= \hat{U}\left[c_0 + \sum_i c_i \hat{A}_i + \sum_{i,k} c_{ik} \hat{A}_i \hat{A}_k + \dots\right]\hat{U}^+ = \\ &= c_0 + \sum_i c_i \hat{U}\hat{A}_i\hat{U}^+ + \sum_{i,k} c_{ik} \hat{U}\hat{A}_i\hat{A}_k\hat{U}^+ + \dots = 0. \quad (1) \end{aligned}$$

Учитывая, что $O^+O = 1$, произвольный член суммы, входящей в выражение (1), можно записать в виде

$$\begin{aligned} c_{ik\dots n} \hat{U}\hat{A}_i\hat{A}_k\dots \hat{A}_n\hat{U}^+ &= c_{ik\dots n} \hat{U}\hat{A}_i\hat{U}^+\hat{U}\hat{A}_k\hat{U}^+\dots \hat{U}^+\hat{U}\hat{A}_n\hat{U}^+ = \\ &= c_{ik\dots n} \hat{A}'_i\hat{A}'_k\dots \hat{A}'_n, \end{aligned}$$

т. е. (1) принимает вид

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

что по форме совпадает с исходным соотношением и доказывает инвариантность этого соотношения по отношению к унитарному преобразованию операторов.

1.62. Из условия $\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+$ следует $\text{Sp } \hat{A}' = \text{Sp}(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+) = \text{Sp}(\hat{A}\hat{U}^+\hat{U}) = \text{Sp } \hat{A}$, так как $\hat{U}^+\hat{U} = 1$ и $\text{Sp}(\hat{A}\hat{B}\dots\hat{D}) = \text{Sp}(\hat{B}\dots\hat{D}\hat{A})$.

Аналогично $\det A' = \det(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+) = \det(\hat{A}\hat{U}^+\hat{U}) = \det \hat{A}$.

1.63. С одной стороны, $\det(\hat{U}\hat{U}^+) = \det \hat{1} = 1$; с другой, $\det(\hat{U}\hat{U}^+) = \det \hat{U} \cdot \det \hat{U}^+$, но $\det \hat{U}^+ = \det \hat{U}^* = [\det \hat{U}]^* = [\det \hat{U}]^*$. Таким образом, $|\det \hat{U}|^2 = 1$, т. е. $\det \hat{U} = \exp(i\alpha)$, где α — вещественное число. Если ввести матрицу $\hat{U}' = \exp(-i\alpha/N)\hat{U}$, N — ранг матрицы \hat{U} , то $\det \hat{U}' = 1$.

1.64.

$$\det \hat{U} = \exp(i \operatorname{Sp} \hat{F}). \quad (1)$$

Для доказательства (1) следует учесть результат 1.62 и совершить унитарное преобразование, диагонализующее эрмитову матрицу \hat{F} . В новом представлении свойство (1) очевидно, но, в силу инвариантности детерминанта и следа матрицы относительно унитарных преобразований, соотношение (1) будет иметь место и в произвольном представлении.

1.65. Всего имеется N^2 независимых матриц A_{nm} (например, набор матриц $A_{nm}^{(ik)} = \delta_{in}\delta_{km}$; $i, k = 1, 2, \dots, N$). Очевидно, столько же имеется независимых эрмитовых матриц. Число независимых унитарных матриц также равно N^2 , так как между эрмитовыми и унитарными матрицами имеется соответствие: $\hat{U} = \exp(i\hat{F})$ (см. 1.59). Чтобы унитарная матрица была унимодулярной, необходимо $\operatorname{Sp} \hat{F} = 0$ (см. предыдущую задачу). Из этого условия следует, что число независимых унимодулярных унитарных матриц ранга N равно $N^2 - 1$, как и число независимых эрмитовых матриц с равным нулю следом.

1.66. Связь импульсного и координатного представлений определяется преобразованием

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \Psi(\mathbf{r}) dV \equiv \hat{U}\Psi(\mathbf{r}),$$

т. е. оператор \hat{U} является интегральным оператором с ядром $U(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar)$ (оператор действует на функции $\Psi(\mathbf{r})$). Ядро оператора \hat{U}^+ , действующего на функции $\Phi(\mathbf{p})$, равно

$$U^+(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar).$$

Оператор $\hat{U}\hat{U}^+$ имеет ядро, равное

$$(2\pi\hbar)^{-3} \int \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar) \exp(i\mathbf{p}'\mathbf{r}/\hbar) d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'),$$

т. е. является единичным оператором (в пространстве функций $\Phi(\mathbf{p})$). Аналогично находим $\hat{U}^+\hat{U} = 1$ (в пространстве функций $\Psi(\mathbf{r})$).

Таким образом, $\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = 1$, т. е. оператор \hat{U} — унитарный.

1.67. Операторы $\hat{x}' = O\hat{x}O^+$, $\hat{p}' = O\hat{p}O^+$ имеют вид:

а) $\hat{x}' = -\hat{x}$, $\hat{p}' = -\hat{p}$; б) $\hat{x}' = \hat{x} + a$, $\hat{p}' = \hat{p}$;

в) $\hat{x}' = c\hat{x}$, $\hat{p}' = \frac{1}{c}\hat{p}$.

Приведенные соотношения между операторами \hat{x}' , \hat{p}' и \hat{x} , \hat{p} получаются наиболее просто в координатном представлении. Так, для $O = \hat{T}_a$ имеем

$$\hat{U}^+ = \hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$$

и

$$\begin{aligned} \hat{U}\hat{x}U^+\Psi(x) &= \hat{T}_a\hat{x}\hat{T}_{-a}\Psi(x) = \hat{T}_a[x\Psi(x-a)] = \\ &= (x+a)\Psi(x) = (\hat{x}+a)\Psi(x), \end{aligned}$$

т. е. $\hat{x}' = \hat{x} + a$,

$$\begin{aligned} \hat{U}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\hat{U}^+\Psi(x) &= \hat{T}_a\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\hat{T}_{-a}\Psi(x) = \hat{T}_a\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x-a) = \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial(x+a)}\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x), \end{aligned}$$

т. е. $\hat{p}' = \hat{p}$, и т. д.

Г л а в а 2

ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

2.1.

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2(n+1)^2}{2ma^2}; \quad \Psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a}, & 0 < x < a, \\ 0, & x < 0, x > a. \end{cases} \quad (1)$$

При инверсии координат относительно точки $x = a/2$ в. ф. преобразуются следующим образом:

$$\Psi_n'(x) \equiv \Psi_n(x') = \Psi_n(-x+a) = (-1)^n \Psi_n(x),$$

т. е. имеют определенную четность, равную $(-1)^n$. Это обстоятельство полезно иметь в виду при вычислении интегралов (матричных элементов и т. д.), содержащих в. ф. $\Psi_n(x)$ *).

*) Мы используем такую нумерацию уровней д. с. E_n и с. ф. Ψ_n , при которой основному состоянию отвечает значение $n = 0$. При этом n совпадает с числом нулей в. ф. $\Psi_n(x)$, не считая нулей при $x \rightarrow \pm\infty$ (или на непроницаемых потенциальных стенках, как в точках $x = 0, a$ в данной задаче). Аналогичный смысл имеет радиальное квантовое число $n_r = 0, 1, 2, \dots$ в центральных полях.

2.2. Функция распределения по координатам:

$$d\omega_n(x) = |\Psi_n(x)|^2 dx, \quad \bar{x} = a/2, \quad \overline{x^2} = a^2 \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2(n+1)^2} \right];$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = a^2 \left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2(n+1)^2} \right].$$

В. ф. n -го стационарного состояния в импульсном представлении

$$\Phi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi a \hbar}} \int_0^a \sin \frac{\pi(n+1)x}{a} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx =$$

$$= -\frac{2\sqrt{\pi a \hbar^3}(n+1) \exp(-ipa/2\hbar)}{p^2 a^2 - \pi^2 \hbar^2 (n+1)^2} \cdot \begin{cases} \cos(pa/2\hbar), & n - \text{четное,} \\ i \sin(pa/2\hbar), & n - \text{нечетное,} \end{cases}$$

определяет распределение по импульсам частицы $d\omega_n(p) = |\Phi_n(p)|^2 dp$. Имеем

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) \hat{p} \Psi_n(x) dx = 0,$$

$$\overline{(\Delta p)^2} = \bar{p}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{p} \Psi_n(x)|^2 dx = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{a^2}. \quad (1)$$

Используя полученные значения $\overline{(\Delta x)^2}$ и $\overline{(\Delta p)^2}$, находим

$$\overline{(\Delta x)^2} \overline{(\Delta p)^2} = \hbar^2 \left[\frac{\pi^2 (n+1)^2}{12} - \frac{1}{2} \right] \geq \frac{\hbar^2 (\pi^2 - 6)}{12} \approx \frac{\hbar^2}{3}.$$

Напомним, что в общем случае (см. 1.30)

$$\overline{(\Delta x)^2} \overline{(\Delta p)^2} \geq \hbar^2/4.$$

Отметим, что $\overline{p^k}$ можно найти и по формуле

$$\overline{p^k} = \int p^k d\omega_n(p) = \int_{-\infty}^{\infty} p^k |\Phi_n(p)|^2 dp.$$

Однако вычисление таким способом более трудосложно, чем по формулам (1).

2.3. $T_{nn} = \overline{p^2}/2m = E_n$ (см. предыдущую задачу). $\overline{T^2} = \infty$ (1)
 Бесконечное значение $\overline{T^2}$ следует, например, из вида функции распределения по импульсам частицы, найденной в предыдущей задаче, при $|p| \rightarrow \infty$. Так как $|\Phi_n(p)| \propto p^{-2}$ при $|p| \rightarrow \infty$, то $d\omega_n(p) \propto dp/p^4$ и интеграл, определяющий среднее значение $T^2 \propto p^4$, расходится. Этот же результат можно получить иначе с помощью квантовомеханической формулы для средних

значений

$$\overline{T_{nn}} = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi_n(x) \right|^2 dx,$$

если учесть, что $\hat{p}^2 \Psi_n(x) \equiv -\hbar^2 \Psi_n''(x)$ содержит слагаемые, пропорциональные $\delta(x)$, $\delta(x-a)$ (при первом дифференцировании $\Psi_n(x)$ получается функция, разрывная в точках $x=0$ и $x=a$, производная же разрывной функции пропорциональна δ -функции; $\int \delta^2(x) dx = \infty$).

2.4. а) В. ф. нормирована на единицу при $A = \sqrt{30/a^5}$.

Коэффициенты C_n в разложении в. ф. $\Psi(x)$ по с. ф. гамильтониана $\Psi_n(x)$, указанным в 2.1, равны ($\Psi(x) = \sum C_n \Psi_n(x)$)

$$C_n = \sqrt{\frac{60}{a^6}} \int_0^a x(x-a) \sin \frac{(n+1)\pi x}{a} dx = -\frac{\sqrt{240}}{\pi^3} \frac{1+(-1)^n}{(n+1)^3}, \quad (1)$$

т. е. отличны от нуля лишь для четных n .

Согласно принципам квантовой механики вероятность нахождения частицы в n -м стационарном состоянии равна $\omega_n = |C_n|^2$. Учитывая (1), находим $\omega(E_0) = 960/\pi^6 \approx 0,999$, $\omega(E_2) \approx 0,001$ и т. д.

Используя известные значения сумм (см., например, [13])

$$\sum_{k=0}^{\infty} (2k+1)^{-4} = \pi^4/96, \quad \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1)^{-2} = \pi^2/8,$$

находим

$$\bar{E} = \sum E_n \omega_n = \frac{10}{\pi^2} E_0 \approx 1,014 E_0; \quad \overline{E^2} = \sum E_n^2 \omega_n = \frac{120}{\pi^4} E_0^2;$$

$$\sqrt{(\Delta E)^2} = \frac{2\sqrt{5}}{\pi^2} E_0.$$

б) В. ф. нормирована на единицу при $B = \sqrt{8/3a}$. Вероятности ω_n отличны от нуля лишь для четных n и равны

$$\omega_n = \frac{256}{3\pi^2} \frac{1}{(n+1)^2 [(n+1)^2 - 4]^2}, \quad n - \text{четное};$$

$$\omega(E_0) = 0,961; \quad \omega(E_2) \approx 0,038 \text{ и т. д.};$$

$$\bar{E} = 4E_0/3, \quad \overline{E^2} = 16E_0^2/3, \quad \Delta E = \sqrt{(\Delta E)^2} = 4\sqrt{2} E_0/3.$$

2.5. В энергетическом представлении операторы \hat{x} , \hat{p} являются матрицами

$$X_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{x} \Psi_n dx, \quad P_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{p} \Psi_n dx, \quad (1)$$

где $\Psi_n(x)$ — с. ф. гамильтониана, приведенные в 2.1.

Вычисление интегралов, входящих в (1), дает

$$X_{mn} = \begin{cases} \frac{4a}{\pi^2} \frac{(m+1)(n+1)[(-1)^{m+n}-1]}{(m-n)^2(m+n+2)^2}, & m \neq n, \\ a/2, & m = n, \end{cases}$$

$$P_{mn} = \begin{cases} -\frac{2i\hbar}{a} \frac{(m+1)(n+1)[1-(-1)^{m+n}]}{(m-n)(m+n+2)}, & m \neq n, \\ 0, & m = n. \end{cases}$$

Эти матрицы (операторы) действуют на в. ф. в энергетическом представлении, которая описывается столбцом

$$C = \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix},$$

где C_n — коэффициенты разложения в. ф. $\Psi(x)$, отличной от нуля лишь в области ямы $0 < x < a$, в ряд по с. ф. $\Psi_n(x)$ гамильтониана.

2.6. Сделаем в у. Ш.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_n''(x) + \left[\frac{kx^2}{2} - e\mathcal{E}_0 x \right] \Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x) \quad (1)$$

($V(x) = -e\mathcal{E}_0 x$ — потенциальная энергия заряженной частицы в однородном электрическом поле \mathcal{E}_0) замену переменной $x \rightarrow z = x - e\mathcal{E}_0/k$, приводим (1) к виду, представляющему у. Ш. для обычного гармонического осциллятора (без поля), и получаем решение (1):

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2) - e^2\mathcal{E}_0^2/2k, \quad \omega = \sqrt{k/m}, \quad n=0, 1, \dots,$$

$$\Psi_n(x) = \Psi_n^{\text{ocu}}(z) = \Psi_n^{\text{ocu}}(x - e\mathcal{E}_0/k),$$

где $\Psi_n^{\text{ocu}}(x)$ представляют хорошо известные в. ф. стационарных состояний гармонического осциллятора. Отметим, что под действием однородного поля все уровни энергии осциллятора смещаются на одинаковую величину.

2.7. В. ф. четных стационарных состояний д. с. имеют вид ($E \leq 0$)

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \cos[\sqrt{2m(U_0 - |E|)/\hbar^2} x], & |x| \leq a, \\ B \exp[-\sqrt{2m|E|/\hbar^2} |x|], & |x| > a. \end{cases} \quad (1)$$

Непрерывность в. ф. и ее производной в точке $x = a$ приводит к трансцендентному уравнению, определяющему спектр четных уровней:

$$\sqrt{U_0 - |E|} \operatorname{tg} \sqrt{2m(U_0 - |E|)a^2/\hbar^2} = \sqrt{|E|} \quad (2)$$

(при этом в точке $x = -a$ условия шивания в. ф. будут выполнены автоматически в силу четности функции).

Аналогично находим уравнение для нечетных уровней частицы:

$$\sqrt{U_0 - |E|} \operatorname{ctg} \sqrt{2m(U_0 - |E|) a^2 / \hbar^2} = -\sqrt{|E|}. \quad (3)$$

Анализ уравнений (2), (3) удобно проводить графически. Так как этот анализ очень прост (и доступен даже школьнику), приведем лишь окончательные результаты.

а) Уравнение (2) при $0 < |E| < U_0$ имеет N_+ корней (N_+ — число четных состояний д. с.), определяемых условием

$$(N_+ - 1)\pi < \sqrt{2mU_0 a^2 / \hbar^2} \leq N_+ \pi, \quad (4)$$

т. е. при любых параметрах ямы есть хотя бы один четный уровень.

б) Число N_- корней уравнения (3) определяется соотношением

$$N_- \pi - \pi/2 < \sqrt{2mU_0 a^2 / \hbar^2} \leq N_- \pi + \pi/2, \quad (5)$$

т. е. нечетные состояния д. с. существуют лишь при условии $mU_0 a^2 \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{8}$.

в) По мере увеличения энергии четные и нечетные уровни чередуются, причем самый нижний уровень — четный.

г) Соотношения (4), (5) можно объединить в одно:

$$(N - 1)\pi/2 < \sqrt{2mU_0 a^2 / \hbar^2} \leq N\pi/2, \quad (6)$$

где N — общее число уровней д. с.: $N = N_+ + N_-$.

д) Реализация знака равенства в правых частях соотношений (4) — (6) соответствует условию появления нового уровня: $(N_+ + 1)$ -го четного, $(N_- + 1)$ -го нечетного или вообще $(N + 1)$ -го уровня, соответственно, при увеличении глубины ямы, т. е. при увеличении параметра $\xi = ma^2 U_0 / \hbar^2$.

В случае глубокой ямы $\xi \gg 1$ введем величину $E'_n = U_0 - |E_n|$ — энергию уровня, отсчитываемую от «дна» ямы. Для нижних уровней частицы (таких, что $E'_n \ll U_0$) из уравнений (2), (3) можно получить следующее приближенное выражение:

$$E'_n \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 (n + 1)^2}{8ma^2} \left[1 - \sqrt{\frac{2}{\xi}} \right], \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

Отметим, что согласно (7) нижние энергетические уровни в глубокой яме лежат несколько ниже уровней в бесконечно глубокой яме такой же ширины $2a$.

2.8. В случае мелкой ямы $ma^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$, как это следует из решения предыдущей задачи, имеется только одно, четное со-

стояние д. с. Для нахождения энергии уровня из уравнения (2) предыдущей задачи следует учесть малость аргумента тангенса и записать это уравнение в виде

$$\sqrt{U_0 - |E_0|} \sqrt{2m(U_0 - |E_0|)a^2/\hbar^2} \approx \sqrt{|E_0|}. \quad (1)$$

Так как $\sqrt{2m(U_0 - |E_0|)a^2/\hbar^2} \ll 1$, то из (1), очевидно, следует $|E_0| \ll U_0$, и, пренебрегая в левой части (1) величиной $|E_0|$ по сравнению с U_0 , находим

$$|E_0| \approx \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} U_0 \ll U_0, \quad (2)$$

т. е. глубина уровня в мелкой яме много меньше глубины ямы (рис. 20).

Приближенный вид нормированной в. ф. основного состояния в мелкой яме

$$\Psi_0(x) \approx B \exp\left[-\sqrt{\frac{2m|E_0|}{\hbar^2}} |x|\right],$$

$$B = (2m|E_0|/\hbar^2)^{1/4} \quad (3)$$

следует из выражения (1) предыдущей задачи для в. ф., если учесть, что как точная, так и приближенная в. ф. в области ямы $|x| \leq a$ почти постоянны.

Искомые средние равны

$$\overline{U(x)} \approx -\frac{4ma^2U_0^2}{\hbar^2} \approx 2E_0, \quad \bar{T} \approx \frac{2ma^2U_0^2}{\hbar^2} \approx -E_0.$$

2.9. Учитывая приближенный вид в. ф. (см. формулу (3) предыдущей задачи), находим: $\bar{x} = 0$, $(\Delta x)^2 = \overline{x^2} = (2\kappa^2)^{-1}$, $\kappa \equiv 2mU_0a/\hbar^2$. Вероятность нахождения частицы внутри ямы

$$\omega = \int_{-a}^a |\Psi_0|^2 dx \approx 2\kappa a \ll 1.$$

Легко заметить, что малая вероятность нахождения частицы в области ямы связана с тем обстоятельством, что в. ф. вне ямы лишь медленно убывает с ростом $|x|$. Действительно, $|\Psi_0|^2 \propto e^{-2\kappa|x|}$, так что частица с заметной вероятностью может находиться на расстоянии $|x| \sim 1/\kappa = \sqrt{\hbar^2/2m|E_0|} \gg a$. Имея это в виду, нетрудно сообразить, что и в случае произвольной потенциальной ямы, характерные размеры которой порядка a , частица с подавляющей вероятностью будет находиться вне ямы (в классически недоступной области), если ее энергия удовлетворяет условию $|E_n| \ll \hbar^2/2ma^2$ (такие энергетические уровни называют мелкими).

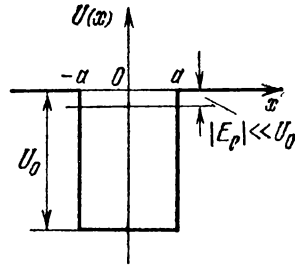


Рис. 20.

Приближенный вид в. ф. в импульсном представлении:

$$\Phi_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \Psi_0(x) dx \approx \frac{\sqrt{2\kappa^3\hbar^3}}{\sqrt{\pi} (p^2 + \hbar^2\kappa^2)}^* \quad (1)$$

$$\bar{p} = 0, \quad \overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} = (\kappa\hbar)^2, \quad \overline{(\Delta x)^2} \overline{(\Delta p)^2} = \hbar^2/2.$$

$$2.10. \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + [\tilde{U}(x) + \alpha\delta(x - x_0)] \Psi = E\Psi. \quad (1)$$

Из у. Ш. (1) вытекают непрерывность в. ф. $\Psi(x)$ в точке x_0 и разрывный характер производной в. ф. в этой точке. Величина скачка производной в. ф. должна быть такой, чтобы δ -функциональное слагаемое в функции $\Psi''(x)$ (производная разрывной функции пропорциональна δ -функции) компенсировало слагаемое $\alpha\delta(x - x_0)\Psi(x_0)$ в левой части уравнения (1). Проинтегрировав (1) по области $x_0 - \varepsilon < x < x_0 + \varepsilon$, $\varepsilon > 0$, и устремляя $\varepsilon \rightarrow 0$, находим

$$\Delta\Psi'(x_0) \equiv \Psi'(x_0 + 0) - \Psi'(x_0 - 0) = (2m\alpha/\hbar^2) \Psi(x_0), \quad (2)$$

$$\Psi(x_0 + 0) = \Psi(x_0 - 0).$$

2.11. У. Ш. и его решение имеют вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' - \alpha\delta(x) \Psi = E\Psi; \quad E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}, \quad \kappa > 0;$$

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \exp(-\kappa x), & x > 0, \\ B \exp(\kappa x), & x < 0. \end{cases}$$

Используя соотношения (2) предыдущей задачи (с учетом замены $\alpha \rightarrow -\alpha$), находим $A = B$ и $\kappa = \kappa_0 = m\alpha/\hbar^2$, $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$, т. е. имеется только одно состояние дискретного спектра, нормированная в. ф. которого имеет вид $\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0} \exp[-\kappa_0|x|]$. Эта функция, как и следовало ожидать, является четной.

Имеем

$$\bar{U} = -\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \Psi_0^2(x) dx = -m\alpha^2/\hbar^2 = 2E_0;$$

$$\bar{T} = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{p}\Psi_0(x)|^2 dx = m\alpha^2/2\hbar^2 = -E_0.$$

*) Полученное выражение для $\Phi_0(p)$ несправедливо при больших импульсах $|p| \gg \hbar/a = \hbar\kappa/\kappa_0 \gg \hbar\kappa$, так как при таких значениях p при вычислении интеграла в (1) является существенным точный вид в. ф. $\Psi_0(x)$ в области $|x| \leq a$. Точная в. ф. $\Phi_0(p)$ при $|p| \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\Phi_0(p) \approx \sqrt{\frac{2\kappa^3\hbar^3}{\pi a^2}} \frac{1}{p^3} \sin \frac{pa}{\hbar}.$$

Потенциал $U(x) = -\alpha\delta(x)$ можно получить предельным переходом $a \rightarrow 0$, $U_0 \rightarrow \infty$, $2aU_0 = \alpha$ из потенциала, рассмотренного в 2.7 и 2.8. При таком переходе $\xi = ma^2U_0/\hbar^2 \rightarrow 0$, т. е. яма является мелкой. Как легко увидеть, приближенные результаты для энергии и в.ф. основного состояния частицы в мелкой яме являются точными для δ -функционального потенциала.

2.12. Обозначим E_n , $\Psi_n(x)$, $n = 0, 1, \dots$, уровни энергии и нормированные в.ф. стационарных состояний в поле $U(x)$. Эти в.ф. имеют определенную четность $(-1)^n$, и в.ф. нечетных уровней при $x=0$ равны $\Psi_{2k+1}(0) = 0$. Для частицы в поле $\tilde{U}(x)$ введем аналогичные обозначения: \tilde{E}_k , $\tilde{\Psi}_k(x)$, $k = 0, 1, \dots$; $\tilde{\Psi}_k(0) = 0$.

Функции $\tilde{\Psi}_k(x)$ и нечетные функции $\Psi_n(x)$ удовлетворяют (при $x \geq 0$) одному и тому же у.Ш. и одинаковым граничным условиям в точках $x=0$ и $x=\infty$; между ними имеется следующее соответствие (рис. 21):

$$E_k = E_{2k+1}, \quad \tilde{\Psi}_k(x) = \sqrt{2} \Psi_{2k+1}(x).$$

Если в поле $U(x)$ имеется N состояний д.с., то число таких состояний в поле $\tilde{U}(x)$ равно $N/2$ при четном N и $(N-1)/2$ при нечетном N . В случае $N=1$ в поле $\tilde{U}(x)$ состояний д.с. нет.

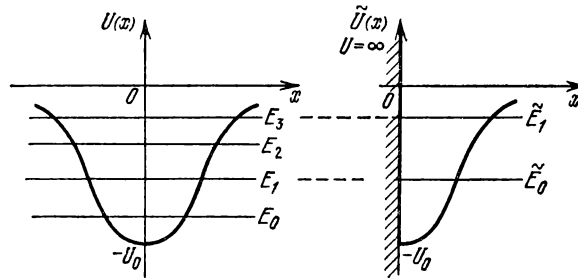


Рис. 21.

2.13. Найдем среднее значение энергии частицы в состоянии, описываемом нормированной в.ф. $\Psi(x, \alpha) = \sqrt{\alpha} \exp[-\alpha|x|]$, $\alpha > 0$ — некоторый параметр. Учитывая, что $\bar{T} = p^2/2m =$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dx} \Psi \right)^2 dx = \hbar^2 \alpha^2 / 2m, \text{ имеем}$$

$$\bar{E}(\alpha) = \hbar^2 \alpha^2 / 2m + \alpha \int \exp[-2\alpha|x|] U(x) dx. \quad (1)$$

Второе слагаемое в (1) при $\alpha \rightarrow 0$ равно

$$\alpha \int \exp[-2\alpha|x|] U(x) dx \approx \alpha \int U(x) dx < 0. \quad (2)$$

Используя (1) и (2), легко заметить, что при достаточно малых значениях параметра α величина $\bar{E}(\alpha)$ отрицательна; но $\bar{E}(\alpha) \geq E_0$, где E_0 — энергия основного состояния. Таким образом, $E_0 < 0$ и основное состояние относится к дискретному спектру.

2.14. Введя обозначения $E = \epsilon \hbar^2 / 2ma^2$, $z = x/a$, запишем у. Ш. в виде

$$-\frac{d^2\Psi}{dz^2} + \xi f(z)\Psi = \epsilon\Psi \quad \left(\xi = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}\right). \quad (1)$$

Обозначив $\epsilon_n(\xi)$, $\tilde{\Psi}_n(z, \xi)$ с.з. д.с. и нормированные с.ф. уравнения (1), получаем решение у. Ш. в поле $U = U_0 f(x/a)$:

$$\Psi_n(x) = \tilde{\Psi}_n(x/a) / \sqrt{a}, \quad E_n = \epsilon_n \hbar^2 / 2ma^2 = \epsilon_n U_0 / \xi,$$

$$\bar{x}_{nn} = a\bar{z}_{nn}, \quad \overline{(\Delta x)^2} = a^2 \overline{(\Delta z)_{nn}^2}.$$

Величины ϵ_n , \bar{z} , $\overline{(\Delta z)^2}$ (усреднение проводится по функциям $\tilde{\Psi}_n$) зависят только от значения параметра ξ .

2.15. Потенциальная энергия частицы имеет вид (рис. 22)

$$U(z) = \begin{cases} mgz, & z > 0, \\ \infty, & z < 0 \end{cases}$$

(направление $(-g)$ принято за положительное направление оси z , отражающая плоскость $z = 0$). Так как движение вдоль осей x, y является свободным и в данной задаче не представляет интереса, в дальнейшем будем рассматривать движение частицы только вдоль оси z .

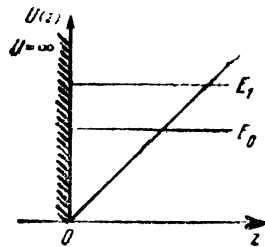


Рис. 22.

Заменой переменной $x = (2m^2g/\hbar^2)^{1/3}(z - E/mg)$ у. Ш. в поле $U(z)$ приводится к виду

$$\Psi''(x) - x\Psi(x) = 0. \quad (1)$$

Решением уравнения (1), убывающим при $x \rightarrow \infty$, является функция Эйри $\Phi(x)$, т. е. $\Psi(z) = A\Phi\left[\left(\frac{2m^2g}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(z - \frac{E}{mg}\right)\right]$. Квантование энергетических уровней возникает в силу граничного условия

$$\Psi(z=0) = \Phi\left[-(2m^2g/\hbar^2)^{1/3} E/mg\right] = 0. \quad (2)$$

Обозначив $(-\alpha_k)$ ($k = 1, 2, \dots$) последовательность корней функции Эйри в порядке возрастания α_k , находим из (2) энергетический спектр:

$$E_n = (mg^2\hbar^2/2)^{1/3} \alpha_{n+1}, \quad n = 0, 1, \dots$$

В частности, энергия основного состояния равна ($n=0$, $\alpha_1 \approx 2,34$)

$$E_0 = 2,34 (mg^2 \hbar^2 / 2)^{1/3} = 1,86 (mg^2 \hbar^2)^{1/3}.$$

2.16. В. ф. основного состояния является четной: $\Psi_0(x) = \Psi_0(-x)$, и достаточно найти ее при $x \geq 0$ (при этом $\Psi_0'(0) = 0$). У. Ш. при $x \geq 0$ с помощью подстановок $y = \xi \exp(-x/2a)$, $E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$, $\xi = \sqrt{8ma^2 U_0 / \hbar^2}$, $\nu = 2\kappa a$ ($\kappa > 0$) приобретает вид уравнения Бесселя:

$$\frac{d^2 \Psi}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{d\Psi}{dy} + (1 - \nu^2 / y^2) \Psi = 0. \quad (1)$$

Так как при $x \rightarrow \infty$ (при этом $y \rightarrow 0$) в. ф. $\Psi(x)$ должна убывать, решение уравнения (1) следует выбрать в виде ($x \geq 0$)

$$\Psi(x) = C J_\nu(y) = C J_\nu[\xi \exp(-x/2a)]. \quad (2)$$

Условие $\Psi'(x=0) = 0$ определяет спектр четных уровней:

$$J'_\nu(\xi) = J'_{\sqrt{8m|E|a^2/\hbar^2}}(\sqrt{8mU_0a^2/\hbar^2}) = 0; \quad (3)$$

при этом основному уровню отвечает наибольшее значение $|E|$.

В случае мелкой ямы $\xi \ll 1$, воспользовавшись формулой

$$J'_\nu(\xi) \approx \frac{\nu}{2\Gamma(\nu+1)} (\xi/2)^{\nu-1} - \frac{\nu+2}{2\Gamma(\nu+2)} (\xi/2)^{\nu+1}, \quad \xi \ll 1,$$

уравнение (3) можно приближенно записать в виде

$$\nu(\nu+1) - (\nu+2)\xi^2/4 \approx 0,$$

откуда

$$\nu = \nu_0 \approx \xi^2/2, \quad \kappa_0 = 2maU_0/\hbar^2, \quad E_0 = -\hbar^2 \kappa_0^2 / 2m. \quad (4)$$

Нетрудно заметить, что при этом нормированную в. ф. основного состояния можно приближенно записать в виде (так как

$$J_\nu(y) \approx \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} (y/2)^\nu \quad \text{при } y \ll 1)$$

$$\Psi_0(x) = C J_\nu[\xi \exp(-|x|/2a)] \approx \sqrt{\kappa_0} \exp[-\kappa_0 |x|]. \quad (5)$$

Результаты (4) и (5) для основного состояния в мелкой яме находятся в согласии с результатами задач 2.8 и 2.11: потенциал $U(x) = -\alpha \delta(x)$ можно получить предельным переходом $a \rightarrow 0$, $U_0 \rightarrow \infty$ из потенциала рассматриваемой задачи, отождествив α с величиной $\alpha = -\int U(x) dx = 2aU_0$. Таким образом, в случае мелкой ямы произвольного вида $U(x)$ энергия E_0 и в. ф. $\Psi_0(x)$ основного состояния определяются, по существу, не конкретным видом $U(x)$, а значением интеграла $\int U(x) dx$.

2.17. При решении у.Ш. следует учесть условия сшивания решения для δ -функционального потенциала (см. формулы (2) задачи 2.10), граничные условия $\Psi(a) = \Psi(-a) = 0$, а также определенную четность в.ф. стационарных состояний.

В.ф. четных уровней при $0 < |x| \leq a$ имеют вид

$$\Psi(x) = A \sin[k(|x| - a)], \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0. \quad (1)$$

Условия сшивания решения (1) в точке $x = 0$ приводят к соотношению

$$-\operatorname{tg} ka = \frac{k\hbar^2}{ma} \equiv \frac{ka}{\xi} \quad \left(\xi = \frac{maa}{\hbar^2} \right), \quad (2)$$

определяющем спектр четных уровней.

При $\xi \gg 1$ для нижних уровней (таких, что $ka \ll \xi$) в правой части уравнения (2) стоит малая величина. Отсюда следует, что $k_n a = n\pi - \varepsilon$, где $\varepsilon \ll 1$, а $n = 1, 2, \dots$ — порядковый номер корня. Учитывая это, имеем из (2) $-\operatorname{tg} k_n a \approx \varepsilon \approx k_n a / \xi \approx n\pi / \xi$, т. е.

$$k_n^{(+)} \approx \frac{n\pi}{a} (1 - 1/\xi), \quad E_n^{(+)} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} (1 - 2/\xi) \quad (3)$$

(мы ввели индекс (+), указывающий на положительную четность уровней).

Для нечетных уровней в.ф. в области $|x| < a$ имеет вид $\Psi(x) = B \sin(kx)$ и условие $\Psi(a) = 0$ определяет спектр нечетных уровней:

$$k_n^{(-)} a = n\pi, \quad E_n^{(-)} = \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2ma^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4)$$

(отметим, что в нечетных состояниях частица «не чувствует» наличия δ -функционального потенциала $U(x) = \alpha\delta(x)$).

Сравнение (3) и (4) подтверждает указанный в условии задачи характер нижней части спектра: расстояние $\delta E_n \approx 2E_n^{(\pm)}/\xi$ между четным и нечетным уровнями с одинаковым значением n много меньше расстояния $\Delta E = |E_{n \pm 1} - E_n| \sim E_n^{(\pm)}/n$ до соседней пары уровней ($n \ll \xi$).

Спектр четных уровней в области энергий $ka \gg \xi$ (например, сильно возбужденные уровни) легко найти из (2), положив $k_n a = (n - 1/2)\pi + \varepsilon$, $\varepsilon \ll 1$ ($n = 1, 2, \dots$ — порядковый номер четного уровня),

$$-\operatorname{tg} k_n a \approx 1/\varepsilon \approx k_n a / \xi \approx (n - 1/2)\pi / \xi, \\ k_n^{(+)} a \approx (n - 1/2)\pi + \xi / (n - 1/2)\pi, \quad E_n^{(+)} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 (2n - 1)^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2 \xi}{ma^2}. \quad (5)$$

Первое слагаемое в выражении для $E_n^{(+)}$ описывает спектр четных уровней в бесконечно глубокой потенциальной яме, второе — смещение этих уровней под действием потенциала $\alpha\delta(x)$.

Объяснить характер нижней части спектра при $\xi \gg 1$ и рас-

смотреть случай $\alpha < 0$, $m|\alpha|a/\hbar^2 \gg 1$ читателю предлагается самостоятельно.

2.18. При достаточно быстром убывании $U(x)$ в у.Ш. при $x \rightarrow \pm\infty$ можно пренебречь $U(x)$, так что у.Ш. и его решение принимают вид ($E=0$)

$$\Psi''(x) = 0, \quad \Psi(x) \approx A_{\pm} + B_{\pm}x, \quad x \rightarrow \pm\infty,$$

т. е. решение является, вообще говоря, возрастающим при $x \rightarrow \pm\infty$. При произвольных параметрах потенциала не существует решения у.Ш., которое не возрастало бы как при $x \rightarrow +\infty$, так и при $x \rightarrow -\infty$ (совершенно аналогично тому, как не существует убывающего при $x \rightarrow \pm\infty$ решения у.Ш. при произвольной энергии $E < 0$). Только при специальном выборе параметров потенциала (например, параметра α , если записать $U(x)$ в виде $U(x) = \alpha \tilde{U}(x)$) такие, не возрастающие при $x \rightarrow \pm\infty$ решения у.Ш. существуют. При этом поле $U(x)$ является критическим в том смысле, что при малейшем углублении потенциала, т. е. при изменении поля на величину $\delta U(x) \leq 0$, в поле появляется новое состояние дискретного спектра, т. е. число состояний д. с. возрастает на единицу.

Чтобы понять описанный выше характер решений у.Ш. с $E=0$, рассмотрим самый верхний энергетический уровень E_n д. с. Его в. ф. $\Psi_n(x)$ имеет при $x \rightarrow \pm\infty$ вид

$$\Psi_n(x) \propto \exp(-\kappa|x|), \quad \kappa = \sqrt{2m|E_n|/\hbar^2}.$$

При уменьшении глубины потенциала все уровни д. с. смещаются вверх (т. е. $|E_n|$ также уменьшается), и самый верхний из них при некотором значении параметров поля принимает значение $E_n=0$, при этом его в. ф. при $x \rightarrow \pm\infty$ имеет вид $\Psi_{E_n=0}(x) \approx \text{const}$. Число нулей функции $\Psi_{E_n=0}$, не возрастающей при $x \rightarrow \pm\infty$, определяет число состояний д. с. с $E < 0$.

Не возрастающее при $x \rightarrow \pm\infty$ решение у.Ш. для указанного в условии задачи потенциала при $E=0$ должно иметь вид ($\kappa = \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$)

$$\Psi_{E=0}(x) = \begin{cases} A, & x < 0, \\ B \cos(\kappa x + \delta), & 0 < x < 2a, \\ C, & x > 2a. \end{cases} \quad (1)$$

Условия непрерывности в. ф. и ее производной в точках $x=0$ и $x=2a$ приводят к соотношениям

$$\delta = 0, \quad A = B, \quad B \cos(2\kappa a) = C, \quad \sin(2\kappa a) = 0, \quad (2)$$

последнее из которых определяет условие существования такого решения. Таким образом, условие $2\kappa a = \sqrt{8mU_0 a^2/\hbar^2} = n\pi$, $n = 1, 2, \dots$, дает значения параметров ямы, при которых в ней появляются новые состояния д. с. по мере ее углубления. Так

как в. ф. $\Psi_{E=0}$ имеет при этом n нулей, то полученное условие есть условие появления $(n+1)$ -го уровня (напомним, что в. ф. основного состояния не имеет нулей).

2.19. Используя соображения, высказанные в предыдущей задаче, найдем условие существования не возрастающего при $x \rightarrow \infty$ решения у. Ш. при $E=0$:

$$\Psi_{E=0}(x) = \begin{cases} Ax, & 0 \leq x < a \quad (\Psi_{E=0}(0) = 0), \\ B, & x > a. \end{cases} \quad (1)$$

Условия сшивания решения в точке $x = a$ (см. 2.10) дают

$$aA = B, \quad 2\xi \equiv 2ma/\hbar^2 = 1, \quad (2)$$

т. е. невозрастающая в. ф. $\Psi_{E=0}$ существует только при одном значении параметра $\xi = \xi_0 = 1/2$, причем эта в. ф. не имеет нулей. Полученные результаты для $\Psi_{E=0}$ и ξ_0 означают, что при $\xi < \xi_0 = 1/2$ в рассматриваемом поле отсутствуют состояния д. с., а при $\xi > \xi_0$ имеется только одно такое состояние.

2.20. Считаем, для определенности, $U_1 \geq U_2$. Состояниям д. с. отвечает энергия $E < U_2$. Найдем условие существования не возрастающей при $x \rightarrow \pm\infty$ в. ф. $\Psi_{E=U_1}$, являющейся решением у. Ш. с $E = U_2$:

$$\Psi_{E=U_1}(x) = \begin{cases} A \exp(-\kappa|x|), & x < 0 \quad (\kappa = \sqrt{2m(U_1 - U_2)/\hbar^2}), \\ B \cos(kx + \delta), & 0 < x < a \quad (k = \sqrt{2mU_2/\hbar^2}), \\ C, & x > a. \end{cases} \quad (1)$$

Условия сшивания в. ф. и ее производных в точках $x = a$ и $x = 0$ дают

$$\delta = -ka, \quad B = C, \quad A = B \cos ka, \quad \kappa = k \operatorname{tg} ka. \quad (2)$$

Последнее из соотношений (2) есть условие существования решения у. Ш. вида (1), не возрастающего при $x \rightarrow \pm\infty$. Используя соображения задачи 2.18, заключаем, что это условие является также условием появления новых состояний д. с. по мере углубления ямы. Если в. ф. (1) не имеет нулей (т. е. $ka < \pi/2$), то речь идет о появлении первого состояния д. с. Таким образом, искомое условие имеет вид

$$\sqrt{2ma^2U_2/\hbar^2} \geq \operatorname{arctg} \sqrt{(U_1 - U_2)/U_2}. \quad (3)$$

В частности, при $U_1 = \infty$ условие (3) принимает вид $U_2 \geq \pi^2\hbar^2/8ma^2$. При $U_1 = U_2$ условие (3) выполнено при любых параметрах ямы, т. е. состояние д. с. всегда существует.

2.21. Оператор силы (в координатном представлении) имеет вид $\hat{F}(x) = -dU/dx$, и равенство $F_{nn} = 0$ вытекает из следую-

ших преобразований:

$$\begin{aligned}
 \bar{F}_{nn} &= - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* (dU/dx) \Psi_n dx = \\
 &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} (U |\Psi_n|^2) dx + \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_n^* U \Psi_n' + \Psi_n'^* U \Psi_n) dx = \\
 &= E_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} |\Psi_n|^2 dx - \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \{(\hat{p}^2 \Psi_n^*) \Psi_n' + \Psi_n'^* \hat{p}^2 \Psi_n\} dx = \\
 &= - \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} (\Psi_n'^* \Psi_n') dx = 0.
 \end{aligned}$$

При преобразованиях были учтены равенства $U(x) = U^*(x)$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} [U |\Psi_n|^2] dx = 0 \text{ и использовано у. Ш. для } \Psi_n, \Psi_n^*.$$

2.22. Бесконечно глубокую потенциальную яму можно получить предельным переходом $U_0 \rightarrow \infty$ из ямы конечной глубины U_0 . В последнем случае оператор силы в координатном представлении имеет вид

$$\hat{F} = -dU/dx = U_0 [\delta(x) - \delta(x-a)] \quad (1)$$

(при нахождении (1) было учтено, что производная ступенчатой функции

$$\eta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x > 0, \end{cases}$$

равна $d\eta(x)/dx = \delta(x)$).

Два слагаемых в выражении (1) представляют операторы сил, действующих на частицу со стороны левой и правой стенок ямы. Рассмотрим силу $F_{\text{пр}} = -U_0 \delta(x-a)$ со стороны правой стенки. Легко заметить, что ее можно записать в виде $F_{\text{пр}} = \partial U / \partial a = \partial H / \partial a$ (так как оператор кинетической энергии не зависит от a).

Используя результат задачи 1.28, находим

$$\overline{(F_{\text{пр}})_{nn}} = \overline{(\partial H / \partial a)_{nn}} = \partial E_n / \partial a, \quad \bar{F}_{\text{пр}} = -2E_n/a < 0. \quad (2)$$

В последнем из соотношений (2) для E_n было использовано значение энергетических уровней частицы в бесконечно глубокой яме.

Сила, действующая на частицу со стороны левой стенки, равна $\bar{F}_л = -\bar{F}_{\text{пр}}$, так как суммарная средняя сила, действующая на частицу, равна нулю (см. предыдущую задачу).

Мы нашли среднюю силу, действующую на частицу со стороны каждой из стенок ямы. Сила, действующая со стороны

частицы на стенки ямы, имеет противоположный знак и направлена, естественно, изнутри в сторону соответствующей стенки.

Выражение (2) совпадает с результатом классической механики для средней по времени силы, действующей на частицу со стороны стенки.

2.23. а) Среднее значение силы, действующей на частицу со стороны правой стенки ямы, согласно первой из формул (2) предыдущей задачи равно

$$\bar{F}_{\text{пр}} = \partial E_0 / \partial (2a) = E_0 / a, \quad E_0 \approx -2ma^2 U_0^2 / \hbar^2, \quad (1)$$

где $2a$ — ширина ямы и для величины E_0 использован результат задачи 2.8.

б) Усредняя оператор силы $F_{\text{пр}} = -U_0 \delta(x - a)$, действующей на частицу со стороны правой стенки ямы, по в. ф. основного состояния, найденной в 2.8, снова приходим к (1).

Результат классической механики для средней по времени силы, действующей на частицу со стороны правой стенки ямы: $\bar{F}_{\text{кл}} = -(U_0 - |E_0|) / a$. Сравнение этой величины с результатом (1) квантовой механики показывает, что $|\bar{F}_{\text{кв}}| \ll |\bar{F}_{\text{кл}}|$.

Такое резкое различие сил в классическом и квантовом случаях можно было ожидать заранее, если иметь в виду результат задачи 2.9, согласно которому связанная мелкой ямой частица находится в области ямы с малой вероятностью (в противоположность классическому случаю, где эта вероятность равна $w_{\text{кл}} = 1$).

2.24. Среднее значение силы, действующей на частицу в стационарном состоянии д. с., равно нулю согласно 2.21. Эта сила складывается из силы, действующей на частицу со стороны стенки, и силы, действующей на частицу со стороны поля $U(x)$ в области $x > 0$. Для последней, используя преобразования, аналогичные проделанным в 2.21, получаем выражение

$$\bar{F}_{nn} = - \int_0^{\infty} |\Psi_n(x)|^2 (d\tilde{U}/dx) dx = -(\hbar^2/2m) |\Psi'_n(0)|^2. \quad (1)$$

Величина (1) представляет также среднее значение силы, действующей со стороны частицы на непроницаемую стенку, расположенную в начале координат ($x = 0$).

Подставляя в формулу (1) значение $\Psi'_n(0)$ для в. ф. частицы в бесконечно глубокой яме (см. 2.1), приходим к результату задачи 2.22.

2.25. Среднее значение силы, действующей со стороны частицы на правую яму, в стационарном состоянии д. с. дается интегралом

$$\overline{(F_{\text{пр}})_{nn}} = \int_0^{\infty} |\Psi_n(x)|^2 (dU/dx) dx. \quad (1)$$

Используя преобразования интеграла (1), аналогичные проделанным в 2.21, находим

$$\overline{(F_{\text{пр}})_{nn}} = \begin{cases} E_n |\Psi_n^{(+)}(0)|^2 < 0, \\ \frac{\hbar^2}{2m} |\Psi_n^{(-)'}(0)|^2 > 0, \end{cases} \quad (2)$$

где индекс (\pm) указывает на четный или нечетный характер в. ф. При получении (2) было учтено, что $\Psi_n'(0) = 0$ для четных и $\Psi_n(0) = 0$ для нечетных в. ф.

2.26. Приведенные в условии задачи в. ф. имеют много общего с в. ф. $\Psi_0(x)$ основного состояния частицы: они удовлетворяют необходимым граничным условиям, не имеют нулей в интервале $0 < x < a$, обладают положительной четностью при инверсии координат относительно центра ямы. Поэтому можно ожидать, что среднее значение энергии частицы в этих состояниях будет достаточно близко к энергии основного состояния и тем самым являться приближенным значением величины E_0 .

При вычислении средней энергии следует учесть, что $\overline{U(x)} = 0$, так как в. ф. равна тождественно нулю при $x \leq 0$ и $x \geq a$, а бесконечно глубокую потенциальную яму можно получить предельным переходом $U_0 \rightarrow \infty$ из ямы конечной глубины. Поэтому вклад в $\overline{U(x)}$ от областей $x \leq 0$, $x \geq a$ равен нулю, как и вклад от области $0 < x < a$, так что $\overline{E} = \overline{T}$.

Учитывая, что $\overline{T} = (\hbar^2/2m) \int |\Psi'(x)|^2 dx$, легко найти среднее значение \overline{E} , предварительно пронормировав в. ф. на единицу (см. также 2.4):

$$\begin{aligned} \text{а) } A^2 &= 30/a^5, & \overline{E} &= 5\hbar^2/ma^2 = 1,014E_0, \\ \text{б) } B^2 &= 8/3a, & \overline{E} &= 2\hbar^2\pi^2/3ma^2 = 1,333E_0, \\ \text{в) } C^2 &= 12/a^3, & \overline{E} &= 6\hbar^2/ma^2 = 1,216E_0. \end{aligned} \quad (1)$$

Как и должно быть, найденные значения \overline{E} больше точного значения $E_0 = \hbar^2\pi^2/2ma^2$ энергии основного состояния. Из (1) следует, что наиболее близкое к E_0 значение дает в. ф. вида а). В случаях б) и в) отличие \overline{E} от E_0 достаточно большое — 20—30%. Эти результаты вполне естественны: вид в. ф. а) наиболее близок к в. ф. $\Psi_0(x) = \sqrt{2/a} \sin(\pi x/a)$ основного состояния частицы. Вид в. ф. б) вблизи стенок ямы сильно отличается от точной в. ф.; так, при $x \rightarrow 0$ $\Psi(x) \propto x^2$, а $\Psi_0(x) \propto x$ (аналогичное различие при $x \rightarrow a$). В. ф. вида в) имеет разрывную при $x = a/2$ производную, в то время как производная в. ф. $\Psi_0(x)$ в этой точке непрерывна.

2.27. Нормируя в. ф. на единицу, найдем $\overline{E}(a)$. При любом значении параметра a имеет место неравенство $\overline{E}(a) \geq E_0$, где E_0 — энергия основного состояния. Выбрав значение $a = a_0$ из условия $\overline{E}(a_0) = \min \overline{E}(a)$, заключаем, что $\overline{E}(a_0)$ представляет наиболее точное приближенное значение (на рассматриваемом

классе пробных функций) величины E_0 (при этом $E_0 \leq E$). Чем ближе пробная функция к в. ф. основного состояния, тем точнее $\bar{E}(a_0)$ воспроизводит значение E_0 .

Расчеты в данной задаче очень просто произвести, если учесть значение интеграла ($b > 0, n$ — целое)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(b+x^2)^{n+1}} = \frac{(-1)^n}{n!} \frac{d^n}{db^n} \int \frac{dx}{b+x^2} =$$

$$= \frac{(-1)^n}{n!} \frac{d^n}{db^n} (\pi b^{-1/2}) = \frac{\pi(2n-1)!!}{2^n n! b^{n+1/2}}.$$

$$a) \quad A^2 = (2/\pi a), \quad \bar{T} = \hbar^2/2m \int |\Psi'(x)|^2 dx = \hbar^2/4ma^2, \quad (1)$$

$$\bar{U} = \overline{kx^2/2} = ka^2/2, \quad \bar{E}(a) = \hbar^2/4ma^2 + ka^2/2,$$

$$\bar{E}(a_0) = \min \bar{E}(a) = \hbar\omega/\sqrt{2} \approx 0,71\hbar\omega$$

$$(a_0^2 = \sqrt{\hbar^2/2km}, \quad \omega = \sqrt{k/m});$$

$$б) \quad B^2 = 16/5\pi a, \quad \bar{T} = 7\hbar^2/10ma^2, \quad \bar{U} = ka^2/10, \quad (2)$$

$$\bar{E}(a_0) = \sqrt{7} \hbar\omega/5 \approx 0,53\hbar\omega \quad (a_0^2 = \sqrt{7\hbar^2/km}).$$

Результаты (1) и (2) следует сравнить с точным значением $E_0 = \hbar\omega/2$. Отметим, что в обоих случаях а) и б) имеет место соотношение $\bar{T}(a_0) = \bar{U}(a_0)$ в согласии с теоремой вириала.

Точная в. ф. основного состояния осциллятора, как известно, имеет вид

$$\Psi_0(x) = (\sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} \exp(-x^2/2x_0^2), \quad x_0^2 = \sqrt{\hbar^2/km}.$$

Учитывая, что $\exp(-x) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} (1+x/\nu)^{-\nu}$, замечаем, что использование пробной функции вида $\Psi = A(1+x^2/a^2)^{-\nu}$ при выборе вариационных параметров $a^2 = 2\nu x_0^2, \nu \rightarrow \infty$ дает $\bar{E} \rightarrow E_0$, т. е. точное значение энергии основного состояния.

$$2.28. a) \quad \bar{E}(a) = \hbar^2/4ma^2 - 2a/\pi a,$$

$$\bar{E}(a_0) = \min \bar{E}(a) = -4ma^2/\pi^2 \hbar^2 \approx 0,81E_0;$$

$$б) \quad \bar{E}(a) = 7\hbar^2/10ma^2 - 16a/5\pi a,$$

$$\bar{E}(a_0) = \min \bar{E}(a) = -256ma^2/70\pi^2 \hbar^2 \approx 0,74E_0.$$

2.29. а) При $A^2 = 4\alpha^3$ в. ф. нормирована на единицу. Имеем:

$$\bar{T} = \hbar^2\alpha^2/2m, \quad \bar{U} = 3k/2\alpha, \quad \bar{E}(\alpha) = \hbar^2\alpha^2/2m + 3k/2\alpha, \quad (1)$$

$$\bar{E}(\alpha_0) = \min \bar{E}(\alpha) = (243/16)^{1/3} (k^2\hbar^2/2m)^{1/3} \approx 2,48 (k^2\hbar^2/2m)^{1/3};$$

$$б) \quad B^2 = 4\sqrt{\alpha^3/\pi}, \quad \bar{T} = 3\hbar^2\alpha/4m, \quad \bar{U} = 2k/\sqrt{\pi\alpha},$$

$$\bar{E}(\alpha_0) = \min \bar{E}(\alpha) = (81/2\pi)^{1/3} (k^2\hbar^2/2m)^{1/3} \approx 2,345 (k^2\hbar^2/2m)^{1/3}. \quad (2)$$

Рассчитанные приближенные значения (1) и (2) величины E_0 следует сравнить с точным значением $E_0 = 2,338 (k^2 \hbar^2 / 2m)^{1/3}$.

Отметим, что в обоих случаях имеет место соотношение $2T(\alpha_0) = \bar{U}(\alpha_0)$ в согласии с теоремой вириала.

2.30. Наиболее общий вид полинома третьей степени, удовлетворяющего граничным условиям $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$, следующий:

$$\Psi(x) = Ax(a-x)(x-b). \quad (1)$$

Для того чтобы воспользоваться в. ф. вида (1) для приближенного вычисления энергии первого возбужденного состояния частицы вариационным методом, необходимо выбрать эту функцию ортогональной к в. ф. основного состояния. Этому условию легко удовлетворить, если учесть различную четность в. ф. основного и первого возбужденного состояний по отношению к инверсии координат относительно центра ямы ($x = a/2$): параметр b необходимо выбрать равным $b = a/2$, так что в. ф. принимает вид

$$\Psi(x) = Ax(a-x)(x-a/2). \quad (2)$$

При вычислении \bar{E} в состоянии, описываемом в. ф. (2), удобно сделать замену переменной $x \rightarrow x' = x - a/2$. Простые вычисления приводят к результатам: $A^2 = 840/a^7$ из нормировки в. ф. и

$$\bar{U} = 0, \quad \bar{E} = \bar{T} = 21\hbar^2/ma^2 = 1,06E_1. \quad (3)$$

Как и следует, величина \bar{E} дает ограничение сверху на значение энергии $E_1 = 2\hbar^2\pi^2/ma^2$ первого возбужденного состояния. Найденное значение (3) величины \bar{E} по смыслу расчета представляет приближенное значение энергии первого возбужденного состояния частицы E_1 .

2.31. Так как приведенная функция является нечетной функцией x и поэтому ортогональна к точной в. ф. основного состояния осциллятора, являющейся четной, то значение $\bar{E}(\alpha)$ в состоянии, описываемом в. ф. $\Psi(x, \alpha)$, представляет ограничение сверху на значение E_1 энергии первого возбужденного состояния. Минимизируя $\bar{E}(\alpha)$ по α , найдем $\bar{E}(\alpha_0) = \min \bar{E}(\alpha)$. Это значение $\bar{E}(\alpha_0)$ можно рассматривать как приближенное значение величины E_1 .

Нормируя в. ф. ($A^2 = 2\alpha^3$), находим

$$\bar{T} = (\hbar^2/2m) \int |\Psi'(x)|^2 dx = \hbar^2\alpha^2/2m, \quad \bar{U} = 3k/2\alpha^2,$$

$$\bar{E}(\alpha_0) = \sqrt{3} \hbar\omega \approx 1,73\hbar\omega \quad (\omega = \sqrt{k/m}). \quad (1)$$

Значение (1) для $\bar{E}(\alpha_0)$ следует сравнить с точным $E_1 = 3\hbar\omega/2$.

2.32. Найдем $E(x)$. Если $\bar{E} < 0$, то, так как $E_0 \leq \bar{E} < 0$, можно утверждать, что в рассматриваемом поле имеются состояния

д. с. (E_0 — энергия основного состояния). Таким образом, условие $\bar{E}(\kappa) \leq 0$ является достаточным условием существования в поле состояний д. с. (при этом параметры потенциала выражаются через κ). Выбирая оптимальное значение параметра $\kappa = \kappa_0$ из соотношения $\bar{E}(\kappa_0) = 0$, получаем приближенные значения параметров потенциала, при которых в поле имеются состояния д. с.

$$а) \quad \bar{T} = \hbar^2 |A|^2 / 8m\kappa; \quad \bar{U} = -\alpha a^2 |A|^2 \exp(-2\kappa a).$$

Условие $\bar{E}(\kappa) \leq 0$ принимает вид

$$\xi \equiv m\alpha a / \hbar^2 \geq \exp y / 4y \geq e/4 \approx 0,68 \quad (y \equiv 2\kappa a). \quad (1)$$

$$б) \quad T = 3\sqrt{\pi} \hbar^2 |B|^2 / 16m\sqrt{\kappa}; \quad \bar{U} = -\alpha a^2 |B|^2 \exp(-\kappa a^2).$$

Условие $\bar{E}(\kappa) \leq 0$, гарантирующее наличие состояний д. с., принимает вид

$$\xi \geq \frac{3\sqrt{\pi}}{16y} e^{y^2} \geq \frac{3\sqrt{2\pi e}}{16} \approx 0,77 \quad (y^2 = \kappa a^2). \quad (2)$$

Минимальные значения параметра ξ в правых частях соотношений (1) и (2) следует рассматривать, по смыслу проведенных вычислений, как приближенные значения параметров поля, при которых появляются состояния д. с., и эти значения полезно сравнить с точным значением $\xi_0 = 0,5$. Как и следовало ожидать, вариационный расчет параметра ξ_0 приводит к завышенному значению глубины ямы, при котором в ней появляются состояния д. с.

2.33. Оператор кинетической энергии $\hat{T} = \hat{p}^2 / 2m$ в импульсном представлении имеет вид $\hat{T} = p^2 / 2m$. Оператор потенциальной энергии U , являющийся в координатном представлении оператором умножения $\hat{O} = U(x)$, в импульсном представлении является интегральным оператором с ядром $U(p, p')$, равным

$$U(p, p') \equiv \tilde{U}(p - p'), \quad \tilde{U}(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int U(x) \exp(-ipx/\hbar) dx. \quad (1)$$

Таким образом, у. Ш. в импульсном представлении имеет вид

$$\hat{H}\Phi(p) \equiv \frac{p^2}{2m} \Phi(p) + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{U}(p - p') \Phi(p') dp' = E\Phi(p). \quad (2)$$

2.34. В случае $U(x) = -\alpha\delta(x)$ имеем

$$\tilde{U}(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int U(x) \exp(-ipx/\hbar) dx = -\alpha/2\pi\hbar,$$

и у. Ш. в импульсном представлении (см. предыдущую задачу) принимает вид

$$\frac{p^2}{2m} \Phi(p) - \frac{\alpha}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p) dp = E\Phi(p). \quad (1)$$

Обозначив

$$\int \Phi(p) dp = C, \quad (2)$$

находим решение уравнения (1) в виде ($E = -|E| < 0$)

$$\Phi(p) = \frac{\alpha m}{\pi \hbar} \frac{C}{p^2 + 2m|E|}. \quad (3)$$

Соотношения (2) и (3) должны быть согласованы друг с другом. Исключая из этих выражений C , получаем

$$1 = \frac{\alpha m}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{p^2 + 2m|E|} = \frac{\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}}. \quad (4)$$

Уравнение (4) определяет энергетический спектр частицы. Очевидно, оно имеет только одно решение $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$. Этому уровню отвечает в. ф. (3), которая при выборе $C = \sqrt{2\pi m \alpha/\hbar}$ нормирована на единицу.

2.35. Ядро оператора $O = k\hat{x}^2/2$ в импульсном представлении имеет вид

$$\begin{aligned} U(p, p') &= \frac{k}{4\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(p-p')x\right] dx = \\ &= -\frac{k\hbar}{4\pi} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \int \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(p-p')x\right] dx = -\frac{k\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \delta(p-p'), \end{aligned}$$

и у. Ш. в импульсном представлении принимает вид

$$\left[\frac{p^2}{2m} - \frac{k\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dp^2}\right] \Phi(p) = E\Phi(p),$$

совершенно аналогичный у. Ш. для осциллятора в координатном представлении. Его решение очевидно:

$$\Phi_n(p) = \frac{\exp[-p^2/2m\omega\hbar]}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi m \omega \hbar}} H_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right),$$

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

2.36. Решение уравнения для G_E при $x < x'$ имеет вид

$$G_E(x, x') = A(x') \exp[\kappa(x - x')] + B(x') \exp[-\kappa(x - x')],$$

$$\kappa = \sqrt{2m|E|/\hbar^2} > 0.$$

Условие убывания G_E при $(x - x') \rightarrow -\infty$ требует $B(x') = 0$. Аналогично, при $x > x'$ имеем $G_E = C(x') \exp[-\kappa(x - x')]$. В точке $x = x'$ функция G_E непрерывна, а производная dG_E/dx в этой точке имеет скачок, равный (сравнить с решением задачи 2.10)

$$G'_E(x = x' + 0, x') - G'_E(x = x' - 0, x') = -2m/\hbar^2.$$

Условия сшивания функции Грина G_E в точке $x = x'$ дают $A(x') = C(x') = m/\kappa\hbar^2$, и она представляется в виде

$$G_E(x, x') = \frac{m}{\kappa\hbar^2} \exp(-\kappa|x - x'|). \quad (1)$$

Отметим, что $G_E(x, x')$ зависит только от $|x - x'|$ (а не от x и x' в отдельности). Это свойство функции Грина связано с однородностью пространства (в данной задаче — одномерного) для свободных частиц.

С помощью функции Грина общее решение уравнения ($E < 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) - E\Psi(x) = f(x) \quad (2)$$

можно записать в виде

$$\Psi(x) = A \exp(-\kappa x) + B \exp(\kappa x) + \int_{-\infty}^{\infty} G_E(x, x') f(x') dx'. \quad (3)$$

Если в уравнении (2) положить $f(x) = -U(x)\Psi(x)$, то оно будет представлять у. Ш., а его формальное решение (3) при этом является у. Ш. в интегральной форме. Так как для физических приложений обычно представляют интерес решения у. Ш., не возрастающие при $x \rightarrow \pm\infty$, и так как при этом интегральное слагаемое в (3) оказывается убывающим при $x \rightarrow \pm\infty$ (это легко заметить, если учесть поведение G_E при $x \rightarrow \pm\infty$), то в (3) следует положить $A = B = 0$, так что у. Ш. в интегральной форме принимает вид

$$\Psi(x) = -\frac{m}{\kappa\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\kappa|x - x'|) U(x') \Psi(x') dx'. \quad (4)$$

Уравнение (4) эквивалентно у. Ш. с учетом граничных условий — убывания решения при $x \rightarrow \pm\infty$. Оно имеет решение лишь при значениях $E < 0$, принадлежащих к энергетическому спектру частицы.

К вопросу о функции Грина можно подойти и с несколько иной точки зрения: ее можно рассматривать как линейный оператор G_E , ядро которого в координатном представлении имеет вид $G_E(x, x')$. При этом из уравнения для $G_E(x, x')$ следует

$$(\hat{H} - E) \hat{G}_E = \hat{1}, \quad \hat{H} = \hat{p}^2/2m. \quad (5)$$

Уравнение (5) справедливо в любом представлении. Его формальное решение:

$$\hat{G}_E = \frac{1}{\hat{H} - E}. \quad (6)$$

Учитывая результат задачи 1.51, находим $G_E(x, x')$ — ядро оператора G_E (6) в координатном представлении ($E < 0$):

$$G_E(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{p^2/2m + |E|} \frac{\exp[ip(x-x')/\hbar]}{2\pi\hbar} dp = \\ = \frac{m}{\kappa\hbar^2} \exp(-\kappa|x-x'|),$$

что совпадает с выражением (1).

2.37. Уравнение (4) предыдущей задачи для $U(x) = -\alpha\delta(x)$ принимает вид

$$\Psi(x) = \frac{\alpha m}{\kappa\hbar^2} \Psi(0) \exp(-\kappa|x|). \quad (1)$$

Из (1) следует условие $\alpha m/\kappa\hbar^2 = 1$, определяющее значение единственного уровня д. с. $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$ и вид в. ф. $\Psi_0(x) = A \exp(-\kappa_0|x|)$.

2.38. Рассмотрим $\Psi_0(x)$ — в. ф. основного состояния частицы, $E_0 < 0$ ($|E_n| \leq |E_0|$). Эта функция не имеет нулей при конечных значениях x и является вещественной функцией, причем $\Psi_0(x) \geq 0$ (последнему условию всегда можно удовлетворить соответствующим выбором фазового множителя). Функция $\Psi_0(x)$ удовлетворяет интегральному уравнению — уравнению (4) задачи 2.36. Возьмем в этом уравнении $x = x_0$, где x_0 — точка максимума функции $\Psi_0(x)$:

$$\Psi_0(x_0) = \frac{m}{\kappa_0\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\kappa_0|x_0-x'|) |U(x')| \Psi_0(x') dx'. \quad (1)$$

Замечаем, что подынтегральная функция в правой части (1) — неотрицательная и замена $\exp(-\kappa_0|x_0-x'|) \Psi_0(x')$ в интеграле на $\Psi_0(x_0)$ может только увеличить правую часть (1). Таким образом, находим

$$\Psi_0(x_0) \leq \frac{m}{\kappa_0\hbar^2} \Psi_0(x_0) \int |U(x)| dx.$$

Отсюда

$$|E_n| \leq |E_0| = \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} \leq \frac{m}{2\hbar^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx \right]^2, \quad (2)$$

что и требовалось показать.

Знак равенства в формуле (2) реализуется только в случае δ -функционального потенциала $U(x) = -\alpha\delta(x-a)$. Приближенное равенство (2) имеет место для «мелких» потенциальных ям, удовлетворяющих условию $|U_0|ma^2/\hbar^2 \ll 1$, где U_0 и a — характерные величины потенциала и радиуса его действия.

2.39. Функцию Грина $G_E(x, x')$ ($x, x' \geq 0$) можно найти непосредственно из решения уравнения для G_E аналогично 2.36,

и она имеет вид

$$G_E(x, x') = \frac{m}{\kappa \hbar^2} [\exp(-\kappa |x - x'|) - \exp(-\kappa |x + x'|)] \quad (1)$$

(вид (1) функции Грина представляется очевидным и без вычислений, если иметь в виду результат задачи 2.36).

2.40. У.Ш. для состояний д.с. в интегральной форме (при $U \leq 0$) имеет вид

$$\Psi(x) = \frac{m}{\kappa \hbar^2} \int_0^\infty [\exp(-\kappa |x - x'|) - \exp(-\kappa |x + x'|)] \tilde{U}(x') |\Psi(x') dx'. \quad (1)$$

Будем понимать под $\Psi(x)$ в уравнении (1) в.ф. $\Psi_0(x)$ основного состояния частицы с энергией $E_0 = -\hbar^2 \kappa_0^2 / 2m < 0$, предполагая, что в рассматриваемом поле состояния д.с. существуют. Функция $\Psi_0(x)$ не имеет нулей (не считая нулей при $x=0$ и $x=\infty$), и, не ограничивая общности, ее можно считать вещественной функцией, удовлетворяющей условию $\Psi_0(x) \geq 0$. Возьмем в (1) $x = x_0$, где x_0 — точка максимума функции $\Psi_0(x)$, и вынесем из-под знака интеграла в (1) функцию $\Psi_0(x')$ в точке $x' = x_0$ — при этом правая часть (1) может только увеличиться (так как подынтегральная функция неотрицательна); сокращая на $\Psi_0(x_0) > 0$, получим

$$1 \leq \frac{m}{\kappa_0 \hbar^2} \int_0^\infty [\exp(-\kappa_0 |x_0 - x|) - \exp(-\kappa_0 |x_0 + x|)] \tilde{U}(x) dx. \quad (2)$$

Так как $|x + x'| - |x - x'| \leq 2x'$ (напомним, что $x, x' \geq 0$), то

$$\begin{aligned} 0 &\leq \exp(-\kappa |x - x'|) - \exp(-\kappa |x + x'|) = \\ &= \exp(-\kappa |x - x'|) [1 - \exp(-\kappa |x + x'| + \kappa |x - x'|)] \leq \\ &\leq \exp(-\kappa |x - x'|) [1 - \exp(-2\kappa x')] \leq 2\kappa x', \quad (3) \end{aligned}$$

и, учитывая в соотношении (2) неравенство (3), находим

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty x \tilde{U}(x) dx \geq 1. \quad (4)$$

Условие (4) по смыслу вычислений представляет *необходимое* условие существования в рассматриваемом поле $U(x)$ состояний д.с.

Напомним, что достаточное условие существования состояний д.с. может быть получено с помощью вариационного метода (см. 2.32).

Применение соотношения (4) к потенциальной яме, указанной в условии задачи, дает *необходимое* условие существования

состояний д. с. в виде $U_0 m a^2 / \hbar^2 \geq 1$; точное условие: $U_0 m a^2 / \hbar^2 \geq \pi^2 / 8 \approx 1,24$ (см., например, 2.20).

Отметим, что условие (4) для потенциала $U(x) = -\alpha \delta(x-a)$ является достаточным условием существования состояний д. с.

2.41. Функция Грина $G_E(x, x')$ ($0 \leq x, x' \leq a$) удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} G_E - E G_E = \delta(x - x'),$$

граничным условиям $G_E(x=0, x') = G_E(x=a, x') = 0$ и поэтому имеет вид ($\kappa = \sqrt{2mE/\hbar^2}$)

$$G_E(x, x') = \begin{cases} A(x') \sin \kappa x, & 0 \leq x < x', \\ B(x') \sin \kappa (x - a), & x' < x \leq a. \end{cases} \quad (1)$$

Условия сшивания функции $G_E(x, x')$ (1) в точке $x = x'$, совершенно аналогичные использованным при решении задачи 2.36, позволяют найти $A(x')$ и $B(x')$ и получить окончательное выражение:

$$G_E(x, x') = \frac{-2m \sin[\kappa(x + x' - |x' - x|)/2] \sin[\kappa(x + x' + |x' - x| - 2a)/2]}{\kappa \hbar^2 \sin \kappa a}. \quad (2)$$

Из вида (2) функции Грина G_E следует, что она является аналитической функцией комплексной переменной E ($\kappa = \sqrt{2mE/\hbar^2}$), имеющей следующие особые точки:

- а) точка $E = 0$ — устранимая особая точка;
- б) точка $E = \infty$ — существенно особая точка;
- в) точки $E_n = \hbar^2 \kappa_n^2 / 2m$, где $\kappa_n a = (n + 1)\pi$, $n = 0, 1, 2, \dots$,

являющиеся полюсами функции Грина G_E .

Очевидно, положение полюсов E_n функции G_E в плоскости комплексной переменной E совпадает со значениями E_n энергетических уровней частицы в яме.

2.42. а) Ответом на вопрос является результат задачи 2.38, т. е. $U(x) = -\alpha \delta(x - a)$.

б) Максимальное число состояний д. с. в условиях данной задачи равно бесконечности. Это следует из того, что условия задачи удовлетворяют потенциалы $U(x)$, имеющие при $x \rightarrow \pm\infty$ вид $U(x) \sim -\alpha|x|^{-\nu}$, $1 < \nu < 2$. В полях с таким поведением на больших расстояниях, как известно [3], имеются состояния д. с. со сколь угодно малой энергией $E < 0$ — происходит сгущение энергетических уровней д. с. в точке $E = 0$.

2.43. Решение у. Ш. для свободной частицы при $x \geq 0$, удовлетворяющее условию $\Psi(0) = 0$, имеет вид $\Psi_k(x) = A(k) \sin(kx)$, $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$. Выберем $A(k)$ из условия нормировки

$$\int_0^\infty \Psi_k(x) \Psi_{k'}^*(x) dx = \delta(k - k'). \quad (1)$$

Учитывая хорошо известные формулы

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx) dx = \delta(k),$$

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos(kx) dx = \delta(k),$$

находим

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \Psi_k(x) \Psi_{k'}^*(x) dx &= \frac{1}{2} A(k) A^*(k') \int_0^{\infty} \{ \cos[(k - k')x] - \\ &- \cos[(k + k')x] \} dx = \frac{\pi}{2} A(k) A^*(k') \delta(k - k') = \\ &= \frac{\pi}{2} |A(k)|^2 \delta(k - k'). \end{aligned}$$

Таким образом, $A(k) = \sqrt{2/\pi}$ и нормированные на δ -функцию по k с. ф. гамильтониана имеют вид $\Psi_k(x) = \sqrt{2/\pi} \sin(kx)$, $x > 0$.

С. ф. гамильтониана $\Psi_E(x)$, нормированные на δ -функцию по энергии,

$$\Psi_E(x) = \sqrt{\frac{dk}{dE}} \Psi_k(x) = \left(\frac{2m}{\pi^2 E \hbar^2} \right)^{1/4} \sin \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x \right).$$

Полнота систем функций $\Psi_k(x)$, $\Psi_E(x)$ ($x > 0$)

$$\int_0^{\infty} \Psi_k^*(x') \Psi_k(x) dk = \int_0^{\infty} \Psi_E^*(x') \Psi_E(x) dE = \delta(x - x')$$

является очевидной в силу симметрии в. ф. $\Psi_k(x)$ по отношению к перестановке местами переменных k и x и свойства (1).

2.44. Решение у. Ш. при $x < 0$ и $x > 0$, убывающее при $x \rightarrow +\infty$, имеет вид

$$\Psi_E(x) = \begin{cases} A \sin(kx + \delta), & x < 0 \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2}), \\ C \exp(-\kappa x), & x > 0 \quad (\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}). \end{cases} \quad (1)$$

Условия непрерывности в. ф. и ее производной в точке $x = 0$ дают

$$A \sin \delta = C, \quad kA \cos \delta = -\kappa C, \quad (2)$$

т. е. $\text{tg } \delta = -k/\kappa < 0$, и, считая для определенности, что $-\pi/2 \leq \delta < 0$, имеем из (2) $C = -\sqrt{k^2/(k^2 + \kappa^2)} A$.

Непосредственное вычисление (довольно простое, но несколько громоздкое; его предлагается читателю провести самостоя-

тельно) подтверждает ортогональность в. ф. (1) при различных значениях E .

Для нормировки в. ф. (1) на δ -функцию по энергии или по переменной k значение коэффициента A в (1) следует выбрать таким же, как и в предыдущей задаче, т. е. $A(k) = \sqrt{2/\pi}$ и $A(E) = \sqrt{dk/dE} A(k)$.

Найденные в. ф. $\Psi_E(x)$ (1) при $0 < E \leq U_0$ не образуют полной системы, так как полная система функций — с. ф. гамильтониана — включает и в. ф. состояний частицы с энергией $E > U_0$.

2.45. У. Ш. в импульсном представлении и его решение имеют вид

$$\frac{p^2}{2m} \Phi_E(p) - i\hbar F_0 \frac{d}{dp} \Phi_E(p) = E \Phi_E(p), \quad (1)$$

$$\Phi_E(p) = C(E) \exp\left[-\frac{ip^3}{6m\hbar F_0} + \frac{iEp}{F_0\hbar}\right]. \quad (2)$$

Нормировка в. ф. (2) на δ -функцию по энергии

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_E(p) \Phi_{E'}^*(p) dp = \delta(E - E')$$

дает $C(E) = (2\pi\hbar F_0)^{-1/2}$. Используя это значение для $C(E)$, легко установить полноту системы функций $\Phi_E(p)$ (2):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_E^*(p') \Phi_E(p) dE = \delta(p - p').$$

2.46. Решение у. Ш., описывающее отражение (и прохождение) частиц с энергией $E > U_0$ от потенциальной стенки, при $x < 0$ и $x > 0$ имеет вид (частицы падают на стенку слева)

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x < 0 \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \\ B(k)e^{ik'x}, & x > 0 \quad (k' = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2} > 0). \end{cases} \quad (1)$$

Непрерывность в. ф. (1) и ее производной в точке $x = 0$ приводит к соотношениям

$$1 + A = B, \quad k(1 - A) = k'B; \quad A(k) = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad B(k) = \frac{2k}{k + k'}. \quad (2)$$

Коэффициенты отражения $R = |A|^2$ и прохождения $D = k'|B|^2/k$:

$$R(E) = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}}\right)^2, \quad D(E) = \frac{4\sqrt{E(E - U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0})^2}. \quad (3)$$

Из (3) вытекает, как и следует, соотношение $R(E) + D(E) = 1$.

Предельные случаи:

$$R(E) \approx U_0^2/16E^2 \rightarrow 0 \quad \text{при } E \rightarrow \infty,$$

$$D(E) \approx 4 \sqrt{(E - U_0)/U_0} \rightarrow 0 \quad \text{при } E \rightarrow U_0.$$

2.47. Считаем для определенности, что падающие частицы движутся в положительном направлении оси x . Решение у. Ш., описывающее отражение таких частиц, при $x < 0$ и $x > 0$ имеет вид

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x < 0 \\ B(k)e^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \quad (1)$$

Условия сшивания в. ф. (1) в точке $x = 0$ (см. соотношения (2) задачи 2.10) дают

$$1 + A = B, \quad ik(B - 1 + A) = 2maB/\hbar^2;$$

$$A(k) = \frac{ma}{ik\hbar^2 - ma}, \quad B(k) = \frac{ik\hbar^2}{ik\hbar^2 - ma}. \quad (2)$$

Коэффициенты отражения $R(E) = |A|^2$ и прохождения $D(E) = |B|^2$ обладают, как и следует, свойством $R + D = 1$, причем

$$R(E) \approx ma^2/2E\hbar^2 \rightarrow 0 \quad \text{при } E \rightarrow \infty,$$

$$D(E) \approx 2E\hbar^2/ma^2 \rightarrow 0 \quad \text{при } E \rightarrow 0.$$

Учитывая, что в соотношениях (2) $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, замечаем, что функции $A(E)$ и $B(E)$ являются аналитическими функциями комплексной переменной E , имеющими следующие особые точки:

а) точки $E = 0$ и $E = \infty$ — корневые точки ветвления;

б) полюс в точке E_0 , определяемой условием $i\sqrt{2mE_0} = ma/\hbar$.

Так как функции $A(E)$ и $B(E)$ имеют точки ветвления, то они являются многолиственными функциями (в данной задаче — двухлиственными). Для однозначного определения функций $A(E)$ и $B(E)$ в точках плоскости комплексной переменной E проведем в этой плоскости разрез вдоль вещественной полуоси $E > 0$ (рис. 23) и определим *физический лист* условием, что для точек плоскости E , непосредственно прилегающих к верхнему

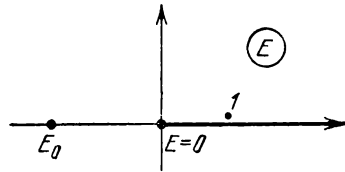


Рис. 23.

«берегу» разреза (точки типа 1 на рисунке), фаза числа E равна нулю (физический лист — один из листов римановой поверхности многолистных функций). Таким образом, при значениях переменной E на верхнем «берегу» разреза физического листа значения аналитических функций $A(E)$ и $B(E)$ совпадают со значениями физических амплитуд отражения $A(E)$ и прохождения $B(E)$ частиц при соответствующих значениях энергии $E > 0$,

Выясним, на каком листе римановой поверхности — физическом или нефизическом — находится точка E_0 , являющаяся полюсом функций $A(E)$ и $B(E)$. Так как фаза точек E на отрицательной полуоси $E < 0$ ($\text{Im } E = 0$) физического листа равна π , то для таких точек на физическом листе $\sqrt{E} = i |\sqrt{E}|$. Учитывая это обстоятельство, замечаем, что точка E_0 находится на физическом листе при $\alpha < 0$, т. е. в случае потенциальной ямы, и значение E_0 совпадает со значением единственного уровня д. с. в поле $U(x) = -|\alpha|\delta(x)$. В случае потенциального барьера $\alpha > 0$ состояния д. с. в поле отсутствуют и полюсы функций $A(E)$ и $B(E)$ находятся на нефизическом листе (фаза E_0 равна 3π). Этот полюс отвечает, как принято говорить, виртуальному уровню.

2.48. Считаем, что падающие частицы движутся слева направо. В. ф., описывающая прохождение и отражение частиц с энергией E от потенциального барьера, является решением у. Ш. и имеет вид

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ikx}, & x < 0 & (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \\ Be^{i\kappa x} + Ce^{-i\kappa x}, & 0 < x < a & (\kappa = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}), \\ Ge^{i\kappa(x-a)}, & x > a. \end{cases} \quad (1)$$

Условия непрерывности в. ф. (1) и ее производной в точках $x = 0$ и $x = a$ приводят к соотношениям

$$\begin{aligned} 1 + A &= B + C, & k(1 - A) &= \kappa(B - C), \\ Be^{i\kappa a} + Ce^{-i\kappa a} &= G, & \kappa(Be^{i\kappa a} - Ce^{-i\kappa a}) &= kG. \end{aligned} \quad (2)$$

Решение системы уравнений (2) позволяет найти амплитуды отражения A и прохождения G частиц:

$$A = \frac{(k^2 - \kappa^2) \sin \kappa a}{(\kappa^2 + k^2) \sin \kappa a + 2i\kappa k \cos \kappa a}, \quad G = \frac{2i\kappa k}{(\kappa^2 + k^2) \sin \kappa a + 2i\kappa k \cos \kappa a}. \quad (3)$$

Приведенные выше результаты справедливы при любом соотношении между E и U_0 . Однако следует иметь в виду, что при $E < U_0$ величина κ — чисто мнимая. Коэффициенты отражения $R = |A|^2$ и прохождения $D = |G|^2$ удовлетворяют соотношению $R + D = 1$. Поэтому приведем значение лишь коэффициента $D(E)$:

$$D(E) = \begin{cases} \frac{4E(E - U_0)}{4E(E - U_0) + U_0^2 \sin^2 \sqrt{2m(E - U_0)} a^2/\hbar^2}, & E > U_0, \\ \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \text{sh}^2 \sqrt{2m(U_0 - E)} a^2/\hbar^2}, & E < U_0. \end{cases} \quad (4) \quad (5)$$

Из точных выражений (4) и (5) для $D(E)$ следует:

$$a) \quad D(E) \approx 1 - \frac{U_0^2}{4E^2} \sin^2 \sqrt{\frac{2ma^2(E-U_0)}{\hbar^2}} \approx 1, \quad E \gg U_0, \quad (6)$$

$$б) \quad D(E) \approx \frac{16E(U_0-E)}{U_0^2} \exp \left[-2 \sqrt{\frac{2ma^2(U_0-E)}{\hbar^2}} \right] \ll 1, \\ \frac{ma^2(U_0-E)}{\hbar^2} \gg 1,$$

$$в) \quad D(E) \approx \frac{4E}{U_0} [\operatorname{sh} \sqrt{2m(U_0-E)a^2/\hbar^2}]^{-2} \ll 1; \\ E \ll \frac{ma^2U_0^2}{\hbar^2}, \quad E \ll U_0,$$

$$г) \quad D(E) \approx \frac{1}{1 + ma^2U_0^2/2E\hbar^2}. \quad (7)$$

В последнем случае $D(E)$ имеет такое же значение, как и в случае δ -функционального потенциала $U(x) = \alpha\delta(x)$ с $\alpha = U_0a = \int U(x) dx$ (см. 2.47).

2.49. Задачу можно решить по образцу предыдущей. Однако легко сообразить, что для коэффициента прохождения $D(E)$ можно непосредственно воспользоваться формулой (4) предыдущей задачи, если в ней заменить U_0 на $-U_0$:

$$D(E) = \frac{4E(E+U_0)}{4E(E+U_0) + U_0^2 \sin^2 \sqrt{2ma^2(E+U_0)/\hbar^2}}, \quad (1)$$

где $U_0 > 0$ — глубина ямы.

В предельных случаях a) и $г)$ (см. условия предыдущей задачи) значение коэффициента $D(E)$ определяется формулами (6) и (7) предыдущей задачи (с заменой U_0 на $-U_0$).

В пределе $E \rightarrow 0$ из выражения (1) следует

$$D(E) = \frac{4E}{U_0 \sin^2 \sqrt{2ma^2U_0/\hbar^2}} \rightarrow 0. \quad (2)$$

Однако формула (2) несправедлива, если выполнено условие $\sqrt{2ma^2U_0/\hbar^2} = n\pi$, $n = 1, 2, \dots$, определяющее те значения параметров ямы, при которых в ней появляются новые уровни д.с. по мере ее углубления (см. 2.18). При выполнении отмеченного условия, как легко заметить из (1), $D(E) \rightarrow 1$ при $E \rightarrow 0$ (сравнить с (2)).

2.50. Считаем, что падающие частицы движутся слева направо. В.ф., являющаяся решением у.Ш. при искомым значениях энергии, имеет вид

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} \exp(ikx), & x < 0 \\ A \sin kx + B \cos kx, & 0 < x < a, \\ C \exp[ik(x-a)], & x > a. \end{cases} \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \quad (1)$$

В области $x < 0$ отраженная волна $G \exp(-ikx)$ отсутствует в соответствии с условием задачи.

Выполняя сшивание в. ф. (1) в точках $x=0$ и $x=a$ (условия сшивания даются соотношениями (2) задачи 2.10), находим

$$\begin{aligned} B = 1, \quad kA - ik = 2ma/\hbar^2, \quad A \sin ka + B \cos ka = C, \\ ikC - kA \cos ka + kB \sin ka = 2m\alpha C/\hbar^2. \end{aligned} \quad (2)$$

Система алгебраических уравнений (2) для определения величин A, B, C , вообще говоря, переопределена. Она имеет решение лишь при выполнении условия

$$\operatorname{tg} ka = -k\hbar^2/am, \quad (3)$$

определяющего значения энергий $E = \hbar^2 k^2/2m$, при которых частицы не отражаются от рассматриваемого потенциального барьера.

2.51. Заменой переменной $x \rightarrow z = -\exp(-x/a)$ у. Ш. приводится к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} z^2 \Psi''_{zz} - \frac{\hbar^2}{2ma^2} z \Psi'_z + \frac{U_0}{1-z} \Psi = E\Psi. \quad (1)$$

Перейдя в уравнении (1) к новой функции $w(z)$ согласно соотношению $\Psi(z) = w(z) z^{-ik_1 a}$, где $k_1 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar^2 > 0$, находим

$$z(1-z)w'' + (1-z)(1-2ik_1 a)w' + (k_1^2 - k^2)a^2 w = 0. \quad (2)$$

Уравнение (2) — уравнение для гипергеометрической функции $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ с параметрами

$$\alpha = -i(k + k_1)a, \quad \beta = i(k - k_1)a, \quad \gamma = 1 - 2ik_1 a. \quad (3)$$

Решение уравнений (1) и (2) для описания процесса отражения частиц, падающих слева, следует выбрать в виде

$$w = F(\alpha, \beta, \gamma, z), \quad \Psi_k(x) = C e^{ik_1 x} F(\alpha, \beta, \gamma, -e^{-x/a}), \quad (4)$$

так как именно такое решение приводит к требуемой асимптотике в. ф. при $x \rightarrow +\infty$ (при этом $z \rightarrow 0$): $\Psi_k(x) \approx C \exp(ik_1 x)$.

Используя известную формулу, связывающую гипергеометрические функции от аргументов z и $1/z$ [12], находим асимптотику в. ф. (4) при $x \rightarrow -\infty$:

$$\begin{aligned} \Psi_k(x) = C \exp(ik_1 x) F(\alpha, \beta, \gamma, -e^{-x/a}) \approx \\ \approx \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\beta - \alpha)}{\Gamma(\beta) \Gamma(\gamma - \alpha)} e^{-ikx} + \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha - \beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} e^{ikx}. \end{aligned} \quad (5)$$

Первое слагаемое в формуле (5) ($k = \sqrt{2mE}/\hbar^2 > 0$) описывает отраженные частицы, а второе — падающие. Используя найденные асимптотики в. ф. при $x \rightarrow \pm\infty$, получаем коэффи-

коэффициент прохождения частиц:

$$D = \frac{I_{\text{прош}}}{I_{\text{пад}}} = \frac{k_1}{k} \left| \frac{\Gamma(\alpha) \Gamma(\gamma - \beta)}{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha - \beta)} \right|^2 = \frac{k_1}{k} \left| \frac{\Gamma[-i(k+k_1)a] \Gamma[1-i(k+k_1)a]}{\Gamma(1-2ik_1a) \Gamma(-2ika)} \right|^2. \quad (6)$$

Это выражение может быть преобразовано к виду (если воспользоваться известными свойствами Γ -функции [12])

$$D(E) = \frac{\text{sh}(2\pi k_1 a) \text{sh}(2\pi k a)}{\text{sh}^2[\pi(k_1 + k)a]}. \quad (7)$$

Из (7) следует

$$D(E) \approx 1 - \frac{2\pi^2 m a^2 U_0^2}{E \hbar^2} \exp\left[-4\pi a \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right] \rightarrow 1, \quad E \rightarrow \infty,$$

$$D(E) \approx \frac{4\pi a \sqrt{2m}}{\hbar} \text{cth}\left(\pi a \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}\right) \sqrt{E - U_0} \propto \sqrt{E - U_0} \rightarrow 0, \quad (8)$$

$$E \rightarrow U_0.$$

2.52. У. Ш. при переходе к новой переменной $z = \text{th}(x/a)$ и введении новой функции $\omega(z)$ согласно формуле ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$)

$$\Psi = (1 - z^2)^{-ika/2} \omega(z) \quad (1)$$

принимает вид

$$(1 - z^2) \omega'' - 2z(1 - ika) \omega' + \left(k^2 a^2 + ika - \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}\right) \omega = 0. \quad (2)$$

Заменой переменной $(1 - z) = 2u$ уравнение (2) приводится к уравнению для гипергеометрической функции $F(\alpha, \beta, \gamma, u)$

$$u(1 - u) \omega''_{.u} + [1 - ika - 2(1 - ika)u] \omega'_{.u} + \left(k^2 a^2 + ika - \frac{2ma^2 U_0}{\hbar^2}\right) \omega = 0 \quad (3)$$

с параметрами

$$\alpha = (1 - 2ika)/2 + \sqrt{1/4 - 2ma^2 U_0/\hbar^2},$$

$$\beta = (1 - 2ika)/2 - \sqrt{1/4 - 2ma^2 U_0/\hbar^2}, \quad \gamma = 1 - ika. \quad (4)$$

В задаче о прохождении частиц, движущихся слева направо, решение уравнения (3) следует взять в виде $\omega = CF(\alpha, \beta, \gamma, u)$, так как именно при таком выборе ω в. ф. Ψ (1) имеет необходимую асимптотику при $x \rightarrow +\infty$:

$$\Psi(x) \approx C (4)^{-ika/2} \exp(ikx), \quad x \rightarrow +\infty \quad (5)$$

(при этом $z \approx 1 - 2 \exp(-2x/a) \rightarrow 1$, $u \rightarrow 0$ и

$$(1 - z^2)^{-ika/2} \approx [4 \exp(-2x/a)]^{-ika/2} \propto \exp(ikx).$$

Таким образом, в. ф. $\Psi_k(x)$ имеет вид

$$\Psi_k(x) = C [\text{ch}^2(x/a)]^{ika/2} F\left(\alpha, \beta, \gamma, \frac{1 - \text{th}(x/a)}{2}\right). \quad (6)$$

Учитывая, что при $x \rightarrow -\infty$ аргумент $u = (1 - \text{th}(x/a))/2$ гипергеометрической функции в (6) равен $u \approx 1 - \exp(2x/a) \rightarrow 1$, и используя соотношение

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} F(\alpha, \beta, \alpha + \beta + 1 - \gamma, 1 - z) + \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} (1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} F(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma + 1 - \alpha - \beta, 1 - z),$$

находим асимптотику в. ф. (6) при $x \rightarrow -\infty$:

$$\Psi_k(x) \approx C(4)^{-ika/2} \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} \exp(ikx) + C(4)^{-ika/2} \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} \exp(-ikx). \quad (7)$$

С помощью формул (4), (5), (7) находим коэффициент прохождения:

$$D(E) = \left| \frac{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)}{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha + \beta - \gamma)} \right|^2 = \frac{\text{sh}^2(\pi ka)}{\text{sh}^2(\pi ka) + \cos^2\left(\pi \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{2ma^2 U_0}{\hbar^2}}\right)}. \quad (8)$$

Выражение (8) справедливо при любых значениях параметров потенциала, в том числе и при $U_0 < 0$, т. е. в случае потенциальной ямы. При $8ma^2 U_0 / \hbar^2 > 1$ аргумент косинуса в (8) чисто мнимый, и удобна замена $\cos(i\pi \xi) = \text{ch} \pi \xi$ ($\xi \equiv \sqrt{2ma^2 U_0 / \hbar^2 - 1/4}$).

Отметим интересное свойство коэффициента $D(E)$: в случае потенциальной ямы $U_0 < 0$ при выполнении условия

$$\sqrt{1/4 + 2ma^2 |U_0| / \hbar^2} = n + 1/2, \quad n = 1, 2, \dots,$$

коэффициент прохождения $D(E)$, согласно (8), при любой энергии частиц равен единице: $D(E) = 1$, т. е. частицы проходят поле без отражения.

Рассмотрим некоторые предельные случаи формулы (8).

а) Слабое поле ($ma^2 |U_0| / \hbar^2 \ll 1$) и медленные частицы ($ka \ll 1$):

$$D(E) \approx \frac{E}{E + 2ma^2 U_0^2 / \hbar^2}. \quad (9)$$

б) Слабое поле и не очень медленные частицы ($ka \gg 1$):

$$D(E) \approx 1 - 4\pi^2 m^2 a^4 U_0^2 / \hbar^4 \text{sh}^2(\pi ka) \approx 1. \quad (10)$$

в) Барьер малой прозрачности ($ma^2 U_0 / \hbar^2 \gg 1$) и быстрые частицы ($ka \gg 1$):

$$D(E) \approx \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{2\pi a}{\hbar} \sqrt{2m} (\sqrt{U_0} - \sqrt{E})\right]}. \quad (11)$$

е) Барьер малой прозрачности и $|E - U_0| \ll U_0$:

$$D(E) \approx \left\{ 1 + \exp \left[-\frac{\pi a}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{U_0}} (E - U_0) \right] \right\}^{-1}. \quad (12)$$

д) Барьер малой прозрачности и $E \rightarrow 0$:

$$D(E) \approx \frac{8\pi^2 m a^2 E}{\hbar^2} \exp \left(-2\pi \sqrt{\frac{2m a^2 U_0}{\hbar^2}} \right) \rightarrow 0. \quad (13)$$

е) Барьер (или яма) произвольной величины и $E \rightarrow \infty$:

$$D(E) \approx 1 - 4 \cos^2 \left(\pi \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{2m a^2 U_0}{\hbar^2}} \right) \exp \left[-2\pi \sqrt{\frac{2m a^2 E}{\hbar^2}} \right] \rightarrow 1. \quad (14)$$

2.53. В. ф., описывающая отражение от потенциального барьера частиц с энергией E , движущихся слева направо, в области $x < 0$ имеет вид

$$\Psi_k(x) = e^{ikx} + A(E) e^{-ikx} \quad \left(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0 \right). \quad (1)$$

Для $x > 0$ у. Ш. заменой переменной $y = \left[\frac{2mU_0}{a\hbar^2} \right]^{1/3} \left(x - a + \frac{Ea}{U_0} \right)$ приводится к виду

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + y\Psi = 0. \quad (2)$$

Как известно, решения уравнения (2) выражаются через цилиндрические функции Z_ν с $\nu = 1/3$:

$$\Psi = C \sqrt{y} Z_{1/3} \left(\frac{2}{3} y^{3/2} \right).$$

В рассматриваемой задаче решение уравнения (2) следует выбрать в виде

$$\Psi_k = C(E) \sqrt{y} H_{1/3}^{(1)} \left(\frac{2}{3} y^{3/2} \right), \quad (3)$$

где $H_{1/3}^{(1)}$ — функция Ганкеля, так как именно такое решение имеет необходимую асимптотику («уходящая» волна) при $x \rightarrow +\infty$ (при этом $y \rightarrow +\infty$):

$$\Psi_k \approx C \sqrt{\frac{3}{\pi \sqrt{y}}} \exp \left(i \left(\frac{2}{3} y^{3/2} - \frac{5\pi}{12} \right) \right).$$

Учитывая, что плотность потока частиц в состоянии, описываемом в. ф. (3), при $x \rightarrow +\infty$ равна

$$j_{\text{прош}} = \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \Psi^* \frac{d}{dx} \Psi - \Psi \frac{d}{dx} \Psi^* \right\} \approx \frac{3}{\pi} |C(E)|^2 \left(\frac{2\hbar U_0}{am^2} \right)^{1/3}, \quad (4)$$

а плотность потока падающих частиц для в. ф. (1) при $x \rightarrow -\infty$

равна $f_{\text{пад}} \equiv \hbar k/m$, находим коэффициент прохождения

$$D(E) = \frac{f_{\text{прош}}}{f_{\text{пад}}} = \frac{3}{\pi k} \left[\frac{2mU_0}{a\hbar^2} \right]^{1/3} |C(E)|^2. \quad (5)$$

Величина $C(E)$ находится из условия шивания в.ф. (1) и (3) в точке $x=0$. Непрерывность в.ф. и ее производной при $x=0$ дает

$$1 + A = C \sqrt{y_0} H_{1/3}^{(1)} \left(\frac{2}{3} y_0^{3/2} \right), \quad iak(1 - A) = C \xi y_0 H_{-2/3}^{(1)} \left(\frac{2}{3} y_0^{3/2} \right), \quad (6)$$

где введены обозначения

$$\xi = (2ma^2U_0/\hbar^2)^{1/3}, \quad y_0 = y(x=0) = \xi(E/U_0 - 1).$$

Из (6) следует

$$C = 2ika \left[\xi y_0 H_{-2/3}^{(1)} \left(\frac{2}{3} y_0^{3/2} \right) + ika \sqrt{y_0} H_{1/3}^{(1)} \left(\frac{2}{3} y_0^{3/2} \right) \right]^{-1}. \quad (7)$$

Учитывая (5) и (7), находим окончательное выражение для $D(E)$:

$$D(E) = \frac{12kaU_0}{\pi |E - U_0| \left| \xi \sqrt{y_0} H_{-2/3}^{(1)} \left(\frac{2}{3} y_0^{3/2} \right) + ika H_{1/3}^{(1)} \left(\frac{2}{3} y_0^{3/2} \right) \right|^2}. \quad (8)$$

В случае барьера, для которого $\xi \gg 1$, и энергии частиц, удовлетворяющей условиям $E < U_0$, $\xi(1 - E/U_0) \gg 1$, формулу (8) можно преобразовать к виду*)

$$D(E) \approx \frac{4\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \exp \left[-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2ma^2(U_0 - E)^3}{\hbar^2 U_0^2}} \right] \ll 1. \quad (9)$$

При $\xi \gg 1$ и $E > U_0$, $\xi |1 - E/U_0| \gg 1$ выражение (8) дает

$$D(E) \approx \frac{4\sqrt{E(E - U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0})^2}. \quad (10)$$

При $E \rightarrow 0$ из выражения (9) следует

$$D(E) \propto k \propto \sqrt{E} \rightarrow 0. \quad (11)$$

Как легко заметить из (8), такое поведение $D(E)$ при $E \rightarrow 0$ имеет место при произвольном значении параметра ξ .

*) При преобразованиях выражения (8) в этом случае следует соблюдать осторожность, так как аргумент функций Ганкеля $\left(\frac{2}{3} y_0^{3/2} = \frac{2}{3} \left[\xi \left(\frac{E}{U_0} - 1 \right) \right]^{3/2} \right)$ при этом равен $3\pi/2$ (аргумент функции Ганкеля в (3) при $y(x) \rightarrow +\infty$ по определению равен нулю), а приводимые в литературе соотношения для цилиндрических функций (в том числе и их асимптотики) обычно относятся к случаю, когда их аргумент по модулю меньше π . Способ преодоления такого осложнения подробно обсуждается в решении задачи 9.34.

2.54. Рассмотрим барьер наиболее общей формы, когда поле $U(x)$ имеет вид потенциальной ступеньки, т. е. $U(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow -\infty$ и $U(x) \rightarrow U_0$ при $x \rightarrow +\infty$ (полученный результат можно обобщить и на случай, когда потенциальная энергия $U(x) \rightarrow -\infty$ при $x \rightarrow -\infty$ и (или) $x \rightarrow +\infty$). Считаем для определенности, что падающие частицы движутся в положительном направлении оси x .

В. ф. рассматриваемой задачи удовлетворяет у. Ш.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_k'' + U(x) \Psi_k = E \Psi_k \quad (1)$$

и имеет следующие асимптотики при $x \rightarrow \pm \infty$:

$$\Psi_k(x) \approx \begin{cases} e^{ikx} + A(k) e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty, \\ B(k) e^{ik_1x}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (2)$$

где

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0, \quad k_1 = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2} > 0.$$

Напишем уравнение, комплексно сопряженное уравнению (1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_k^{*\prime\prime} + U(x) \Psi_k^* = E \Psi_k^*. \quad (3)$$

Умножив (1) слева на Ψ_k^* , а (3) — на Ψ_k и вычтя почленно друг из друга, находим

$$\Psi_k^* \Psi_k'' - \Psi_k \Psi_k^{*\prime\prime} \equiv \frac{d}{dx} (\Psi_k^* \Psi_k' - \Psi_k \Psi_k^{*\prime}) = 0,$$

т. е.

$$\Psi_k^*(x) \Psi_k'(x) - \Psi_k(x) \Psi_k^{*\prime}(x) = \text{const.} \quad (4)$$

Вычислив значения левой части соотношения (4) при $x \rightarrow \pm \infty$ с помощью выражений (2), находим

$$|A(k)|^2 + \frac{k_1}{k} |B(k)|^2 = 1, \quad (5)$$

что и доказывает требуемое равенство, так как $R = |A|^2$ и $D = \frac{k_1}{k} |B|^2$.

Подчеркнем, что соотношение (5) является непосредственным следствием равенства (4), являющегося, в свою очередь, следствием закона сохранения числа частиц (уравнения непрерывности) в квантовой механике: $\text{div } \mathbf{j} + \partial |\Psi|^2 / \partial t = 0$, который применительно к стационарным состояниям ($\partial |\Psi|^2 / \partial t = 0$) принимает вид $\text{div } \mathbf{j} = 0$. Последнее соотношение в одномерном случае ($dj_x/dx = 0$) эквивалентно (4).

2.55. Рассмотрим потенциальный барьер наиболее общего вида, описанный в начале решения предыдущей задачи. Обозначим $\Psi_-(x)$ и $\Psi_+(x)$ в. ф. стационарных состояний, описывающие процесс прохождения частиц с энергией E , падающих на рассматриваемый потенциальный барьер справа и слева соответ-

ственно. Эти в. ф. имеют при $x \rightarrow \pm\infty$ вид

$$\Psi_+(x) \approx \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty, \\ B(k)e^{ik_1x}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (1)$$

$$\Psi_-(x) \approx \begin{cases} \bar{B}(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty, \\ e^{-ik_1x} + \bar{A}(k)e^{+ik_1x}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

где

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} > 0,$$

и удовлетворяют одному и тому же у. Ш.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''_{\pm} + U(x)\Psi_{\pm} = E\Psi_{\pm}.$$

Умножив уравнение для Ψ_+ слева на Ψ_- , а уравнение для Ψ_- — на Ψ_+ и вычитая их почленно, находим

$$\Psi_-(x)\Psi'_+(x) - \Psi_+(x)\Psi'_-(x) = \text{const.} \quad (2)$$

Вычислив левую часть (2) при $x \rightarrow \pm\infty$ с помощью в. ф. (1), получаем $k\bar{B} = k_1B$, или

$$D_+(E) = \frac{k_1}{k}|B|^2 = \frac{k}{k_1}|\bar{B}|^2 = D_-(E),$$

что и доказывает равенство коэффициентов прохождения частиц с данной энергией E через потенциальный барьер независимо от того, с какой стороны (справа или слева) они на него падают.

2.56. В. ф., описывающая прохождение частиц через потенциальный барьер, имеет при $x \rightarrow \pm\infty$ вид

$\Psi(x) \approx$

$$\approx \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \quad \left(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0\right), \\ B(k)\exp(ik_1x), & x \rightarrow +\infty \quad \left(k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} > 0\right). \end{cases}$$

Коэффициент прохождения $D(E)$ равен

$$D(E) = \frac{k_1}{k}|B(k_1)|^2. \quad (1)$$

При $E \rightarrow U_0$ имеем $k_1 \rightarrow 0$, $B(k_1) \rightarrow B(0) \neq 0$ и из (1) находим

$$D(E) \propto \sqrt{E-U_0} \rightarrow 0. \quad (2)$$

2.57. Задачу можно решить по образцу решения задачи 2.36, в котором была найдена функция Грина $G_E(x, x')$ при $E \leq 0$:

$$G_E(x, x') = \frac{m}{\kappa\hbar^2} \exp(-\kappa|x-x'|), \quad \kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} > 0. \quad (1)$$

Легко, однако, сообразить, что вид функций $G_E^{(\pm)}(x, x')$ при $E > 0$ может быть установлен непосредственно из выражения (1), если в нем перейти к $E > 0$ и представить κ в виде

$$\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} = \mp ik, \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0,$$

т. е.

$$G_E^{(\pm)}(x, x') = \pm \frac{im}{k\hbar^2} \exp(\pm ik|x - x'|). \quad (2)$$

С помощью функций Грина (2) у. Ш. при $E > 0$ можно записать в виде интегрального уравнения ($E = p^2/2m$):

$$\Psi(x) = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} - \int_{-\infty}^{\infty} G_E^{(\pm)}(x, x') U(x') \Psi(x') dx'.$$

Легко заметить, что если в последнем уравнении выбрать функцию Грина $G_E^{(+)}$, положить $B = 0$ и $A = 1$, то решение $\Psi_p(x)$ получающегося при этом интегрального уравнения

$$\Psi_p(x) = e^{ipx/\hbar} - \int_{-\infty}^{\infty} G_E^{(+)}(x, x') U(x') \Psi_p(x') dx' \quad (3)$$

описывает прохождение через потенциальный барьер частиц с импульсом p , причем первое слагаемое в правой части (3) описывает падающие частицы, а интегральный член в уравнении (3) при $x \rightarrow \pm\infty$ описывает отраженные частицы и изменение

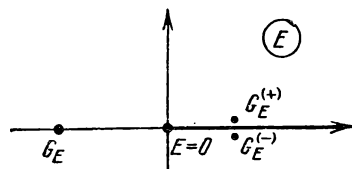


Рис. 24.

в. ф. свободных частиц $\exp(ipx/\hbar)$ под действием потенциала (последнее замечание становится очевидным, если рассмотреть асимптотику второго слагаемого в правой части уравнения (3) при $x \rightarrow \pm\infty$ и учесть, что $k = |p|/\hbar$).

Отметим, что функции Грина свободной частицы $G_E^{(\pm)}$ при $E > 0$ (2) и G_E при $E < 0$, найденную в 2.36, можно рассматривать как различные граничные значения единой аналитической функции

$$\tilde{G}_E(x - x') = i \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2 E}} \exp \left[i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} |x - x'| \right]$$

комплексной переменной E .

Точка $E = 0$ для этой функции является точкой ветвления. Проведя разрез вдоль вещественной полуоси плоскости E от точки $E = 0$ направо (рис. 24), будем рассматривать функцию Грина \tilde{G}_E на физическом листе ее римановой поверхности (см. по этому поводу решение 2.47). Легко заметить, что на верхнем «берегу» разреза (т. е. в точках $E + i0$, $E > 0$) функция \tilde{G}_E сов-

падает с $G_E^{(+)}$, на нижнем «берегу» разреза — с $G_E^{(-)}$, а на полуоси вещественных отрицательных значений E функция \tilde{G}_E совпадает с функцией Грина G_E задачи 2.36.

Отметим также, что на физическом листе $|\tilde{G}_E| \rightarrow 0$ при $|E| \rightarrow \infty$.

2.58. Уравнение (3) предыдущей задачи для в.ф. $\Psi_p(x)$, описывающей прохождение (и отражение) частиц с импульсом p , для потенциала $U(x) = \alpha\delta(x)$ принимает вид

$$\Psi_p(x) = e^{ipx/\hbar} - \frac{im\alpha}{k\hbar^2} e^{ik|x|} \Psi_p(0) \quad (\hbar k = |p| = \sqrt{2mE}). \quad (1)$$

Из уравнения (1) находим $\Psi_p(0)$ (а тем самым и решение этого уравнения):

$$\Psi_p(0) = (1 + im\alpha/k\hbar^2)^{-1}. \quad (2)$$

Учитывая (1) и (2), находим коэффициенты прохождения и отражения:

$$D(E) = \frac{E}{E + m\alpha^2/2\hbar^2}, \quad R(E) = \frac{m\alpha^2/2\hbar^2}{E + m\alpha^2/2\hbar^2}.$$

2.59. Учитывая в уравнении (3) задачи 2.57 явный вид функции Грина $G_E^{(+)}(x, x')$ и перейдя в этом уравнении к пределу $x \rightarrow \pm\infty$, легко приходим к следующим выражениям для коэффициентов прохождения и отражения:

$$D(E) = \left| 1 - \frac{im}{|p|\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} U(x) \Psi_p(x) dx \right|^2, \quad (1)$$

$$R(E) = \frac{m}{p^2\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} U(x) \Psi_p(x) dx \right|^2, \quad (2)$$

где $\Psi_p(x)$ — в.ф., описывающая процесс отражения частиц с импульсом p и нормированная на единичную плотность частиц в падающем потоке.

Г л а в а 3

МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

3.1. Искомый оператор должен преобразовывать произвольную в.ф. координат системы $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ в ту же функцию Ψ , но от координат, повернутых на заданный угол, т. е.

$$\Psi'(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \hat{R}(\Phi_0) \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \Psi(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N), \quad (1)$$

где $\mathbf{r}' = \hat{R}\mathbf{r}$ — радиус-вектор точки пространства, в которую переходит в результате поворота точка с радиусом-вектором \mathbf{r} . Равенство (1) означает, что значение в.ф. состояния системы N частиц не зависит от того, в переменных какой системы коор-

динат (исходной \mathbf{r}' или повернутой \mathbf{r}) описывается положение точек пространства, т. е. в. ф. Ψ является скаляром.

Для нахождения явного вида оператора $\hat{R}(\varphi_0)$ введем временно цилиндрическую систему координат с полярной осью вдоль оси поворота. В этих переменных соотношение (1) принимает вид

$$\begin{aligned}\hat{R}\Psi(\rho_1, z_1, \varphi_1, \dots, \rho_N, z_N, \varphi_N) &= \\ &= \Psi(\rho_1, z_1, \varphi_1 + \varphi_0, \dots, \rho_N, z_N, \varphi_N + \varphi_0) = \\ &= \exp\left(\varphi_0 \sum_{a=1}^N \partial/\partial\varphi_a\right) \Psi(\rho_1, z_1, \varphi_1, \dots, \rho_N, z_N, \varphi_N) \quad (2)\end{aligned}$$

(сравнить с 1.12, где обсуждался оператор сдвига \hat{T}_a). Так как $\hat{L}_z = -i \sum_a \partial/\partial\varphi_a$ является оператором проекции момента импульса системы N частиц на ось z , то искомый оператор поворота имеет вид

$$\hat{R}(\varphi_0) = \exp(i\varphi_0 \hat{L}_z) = \exp(i\varphi_0 \hat{L}), \quad (3)$$

причем второе из представлений (3) оператора \hat{R} является наиболее общим в том смысле, что оно не зависит от конкретного выбора системы координат для описания положений точек пространства (однако существенным является то обстоятельство, что момент определяется по отношению к (произвольной) точке, лежащей на оси поворота).

3.2. Операторы импульса \hat{P} и момента \hat{L} системы связаны простыми соотношениями с операторами преобразования в. ф. при бесконечно малых переносах и поворотах системы координат (см. задачи 1.12 и 3.1):

$$\hat{T}(\delta a) \approx 1 + \frac{i}{\hbar} \delta a \hat{P}, \quad \hat{R}(\delta\varphi_0) \approx 1 + i\delta\varphi_0 \hat{L}.$$

Любой перенос системы координат перестановочен с любым другим переносом, поэтому коммутируют и операторы компонент импульса. Два вращения вокруг двух непараллельных осей не перестановочны друг с другом, что и соответствует некоммутативности операторов различных проекций момента.

3.3. В силу равноправности осей x, y, z имеем

$$\mathbf{L}^2 \equiv \bar{\mathbf{L}}^2 = \bar{L}_x^2 + \bar{L}_y^2 + \bar{L}_z^2 = 3\bar{L}_z^2. \quad (1)$$

Ввиду равновероятности различных значений проекции момента, получаем

$$\bar{L}_z^2 = (2l + 1)^{-1} \sum_{m=-l}^l m^2 = l(l + 1)/3. \quad (2)$$

(Значение суммы, входящей в выражение (2), можно найти следующим образом:

$$\sum_{m=0}^l m^2 = \left[\frac{d^2}{d\alpha^2} \sum_{m=0}^l e^{\alpha m} \right]_{\alpha=0} = \left[\frac{d^2}{d\alpha^2} \frac{1 - e^{\alpha(l+1)}}{1 - e^{\alpha}} \right]_{\alpha=0} = \frac{l(l+1)(2l+1)}{6}.$$

Учитывая (1) и (2), находим $L^2 = l(l+1)$.

3.4. Указанные коммутаторы очень просто вычислить, если использовать соотношения

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}], \\ [\hat{L}_i, \hat{x}_k] &= i\epsilon_{ikl}\hat{x}_l, \quad [\hat{L}_i, \hat{p}_k] = i\epsilon_{ikl}\hat{p}_l. \end{aligned} \quad (1)$$

Так, например, коммутатор $[\hat{L}_i, \hat{r}^2]$ равен

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_k\hat{x}_k] = [\hat{L}_i, \hat{x}_k]\hat{x}_k + \hat{x}_k[\hat{L}_i, \hat{x}_k] = 0 \quad (\epsilon_{ikl}\hat{x}_k\hat{x}_l = 0).$$

Аналогично находятся остальные коммутаторы. Приведем ответ.

а) Все коммутаторы равны нулю, что является проявлением общего свойства равенства нулю коммутатора вида

$$[\hat{L}_i, \hat{f}] = 0, \quad (2)$$

где \hat{f} — оператор скалярной величины.

б) Коммутаторы имеют структуру вида

$$[\hat{L}_i, \hat{f}_k] = i\epsilon_{ikl}\hat{f}_l, \quad (3)$$

где \hat{f}_k — оператор k -й проекции соответствующего векторного оператора (так, для $\hat{\mathbf{r}} = (\mathbf{r}\hat{\mathbf{r}})$ имеем $\hat{f}_k = (\mathbf{r}\hat{\mathbf{r}})\hat{p}_k$ и т. д.).

в) Указанные коммутаторы имеют структуру

$$[\hat{L}_i, \hat{f}_{kl}] = i(\epsilon_{ikp}\delta_{nl} + \epsilon_{iln}\delta_{kp})\hat{f}_{pn}, \quad (4)$$

где \hat{f}_{kl} — операторы компонент соответствующего тензора (так, в первой задаче этого пункта $\hat{f}_{kl} = \hat{x}_k\hat{x}_l$ и т. д.).

Установленная универсальная структура (2)–(4) коммутаторов оператора компонент момента \hat{L}_i со скалярными, векторными и тензорными операторами является отражением свойства оператора $\hat{\mathbf{L}}$ как оператора, описывающего преобразование в. ф. при вращениях системы координат, и того обстоятельства, что при вращениях системы координат все тензоры одинакового ранга преобразуются одинаковым образом (независимо от конкретного вида тензора).

3.5. Операторы $\hat{\mathbf{L}}$ и $\hat{\mathbf{L}}'$ связаны следующим образом:

$$\hat{\mathbf{L}}' = \hat{\mathbf{L}} - \frac{1}{\hbar} [\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{p}}], \quad \hat{L}'_i = \hat{L}_i - \frac{1}{\hbar} \epsilon_{imn} a_m \hat{p}_n.$$

Учитывая вид коммутатора $[L_i, \hat{p}_k] = i\epsilon_{ikl}\hat{p}_l$ и воспользовавшись известным соотношением $\epsilon_{imn}\epsilon_{klm} = \delta_{ik}\delta_{ml} - \delta_{il}\delta_{mk}$, находим

$$[\hat{L}_i, \hat{L}'_k] = i\epsilon_{ikl}\hat{L}_l + \frac{i}{\hbar} \delta_{ik}(\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}) - \frac{i}{\hbar} a_i\hat{p}_k.$$

3.6. Из коммутационных соотношений для матриц момента

$$\hat{L}_i\hat{L}_k - \hat{L}_k\hat{L}_i = i\epsilon_{ikl}\hat{L}_l$$

с учетом формулы $\text{Sp}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Sp}(\hat{B}\hat{A})$ находим $\text{Sp} \hat{L}_i = 0$.

3.7. Оператор момента $\hat{\mathbf{L}}$ системы из двух частиц имеет вид

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{I}}_1 + \hat{\mathbf{I}}_2 = -i \left\{ \left[\mathbf{r}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \right] + \left[\mathbf{r}_2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} \right] \right\}. \quad (1)$$

Перейдем от переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ к новым переменным \mathbf{r}, \mathbf{R} согласно формулам

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r}_1 = \mathbf{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r},$$

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r}.$$

Учитывая, что

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}},$$

выражение (1) можно представить в виде

$$\hat{\mathbf{L}} = -i \left[\mathbf{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] - i \left[\mathbf{R} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right], \quad (2)$$

где первое слагаемое является оператором момента системы двух частиц в с.ц.и., а второе представляет оператор момента, связанного с движением центра масс.

3.8. В классической механике момент двух частиц относительно центра масс равен $\mathbf{M} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$, где \mathbf{r} — относительный радиус-вектор частиц, \mathbf{p} — относительный импульс $\mathbf{p} = m\mathbf{v}_{\text{отн}} = \mu\dot{\mathbf{r}}$ (μ — приведенная масса), и равенство $(\mathbf{r}\mathbf{M}) = 0$ очевидно.

В квантовой механике для доказательства утверждения задачи требуется убедиться в эрмитовости оператора $(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{L}})$ и равенстве его нулю. Так как одноименные компоненты \hat{x}_i и \hat{L}_i коммутируют, то $(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{L}})^+ = (\hat{\mathbf{L}}^+\hat{\mathbf{r}}^+) = \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{L}}$. Далее,

$$\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{L}} = -i \left(\hat{\mathbf{r}} \left[\hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] \right) = -i \left(\left[\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}} \right] \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) = 0.$$

3.9. Искомые функции $\Psi_{r,lm}(r, \theta, \varphi)$ являются решением системы уравнений на с.ф.

$$\hat{r}\Psi_{r,lm} = r\Psi_{r,lm}(r, \theta, \varphi) = r_0\Psi_{r,lm}(r, \theta, \varphi),$$

$$\hat{r}^2\Psi_{r,lm} = l(l+1)\Psi_{r,lm}, \quad \hat{l}_z\Psi_{r,lm} = m\Psi_{r,lm}$$

и, очевидно, имеют вид

$$\Psi_{r,lm}(r, \theta, \varphi) = C(r_0)\delta(r - r_0)Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Коэффициент C , определяемый из условия нормировки

$$\int \Psi_{r_0 l' m'}(r, \theta, \varphi) \Psi_{r_0 l m}(r, \theta, \varphi) dV = \delta(r_0 - r_0') \delta_{l l'} \delta_{m m'},$$

равен $C(r_0) = 1/r_0$.

3.10. а) Оператор момента в координатном и импульсном представлениях имеет вид (так как в импульсном представлении $\hat{\mathbf{r}} = i\hbar \partial/\partial \mathbf{p}$)

$$\hat{\mathbf{l}} = -i \left[\mathbf{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right], \quad \hat{\mathbf{l}} = i \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{p} \right], = -i \left[\mathbf{p} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right].$$

Сравнивая эти выражения и учитывая известный вид с. ф. операторов \hat{l}^2 и \hat{l}_z в \mathbf{r} -представлении, заключаем, что в \mathbf{p} -представлении эти с. ф. имеют вид

$$\Psi_{lm} = Y_{lm}(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi}),$$

где $\tilde{\theta}$, $\tilde{\varphi}$ — полярный и азимутальный углы вектора \mathbf{p} в сферических координатах (в \mathbf{p} -, как и в \mathbf{r} -представлении, оператор момента действует в пространстве угловых переменных).

б) При нахождении с. ф. \hat{l}^2 и \hat{l}_z этим способом следует иметь в виду соотношение

$$\int Y_{lm}(\mathbf{n}) \exp(-ikr \mathbf{n} \mathbf{n}_0) d\Omega_{\mathbf{n}} = (-i)^l 4\pi \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(\mathbf{n}_0),$$

где \mathbf{n} , \mathbf{n}_0 — единичные векторы, $Y_{lm}(\mathbf{n}) \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (θ , φ — полярный и азимутальный углы направления вектора \mathbf{n}), $J_{l+1/2}$ — функция Бесселя.

3.11. Учитывая коммутационные соотношения для компонент момента, легко находим

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm} = \hat{l}_{\pm} (\hat{l}_z \pm 1). \quad (1)$$

Применив операторное равенство (1) к с. ф. Ψ_m , получаем

$$\hat{l}_z (\hat{l}_{\pm} \Psi_m) = (m \pm 1) (\hat{l}_{\pm} \Psi_m),$$

т. е. функции $\hat{l}_{\pm} \Psi_m$ также являются с. ф. оператора \hat{l}_z (в частных случаях одна из этих функций (или обе при $l=0$) может оказаться равной нулю тождественно).

3.12. Учитывая результат предыдущей задачи и ортогональность с. ф. эрмитова оператора, отвечающих различным с. з., находим

$$\langle m | \hat{l}_+ | m \rangle \propto \langle m | m + 1 \rangle = 0, \quad \langle m | \hat{l}_+^2 | m \rangle = 0. \quad (1)$$

Так как $\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y$, то из первого из соотношений (1) следует

$$\hat{l}_x + i\hat{l}_y = 0. \quad (2)$$

Средние значения l_x и l_y — вещественные числа, поэтому равенство нулю комплексного числа (2) означает $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$.

Второе из соотношений (1) эквивалентно равенству

$$\overline{l_x^2 - l_y^2} + i(\overline{\hat{l}_x \hat{l}_y} + \overline{\hat{l}_y \hat{l}_x}) = 0,$$

или $\overline{\hat{l}_x \hat{l}_y} + \overline{\hat{l}_y \hat{l}_x}$ — вещественное число)

$$\bar{l}_x^2 = \bar{l}_y^2, \quad \overline{\hat{l}_x \hat{l}_y} + \overline{\hat{l}_y \hat{l}_x} = 0. \quad (3)$$

Из коммутационного соотношения $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z$ следует $\overline{\hat{l}_x \hat{l}_y} - \overline{\hat{l}_y \hat{l}_x} = im$, что дает при учете (3) $\overline{\hat{l}_x \hat{l}_y} = -\overline{\hat{l}_y \hat{l}_x} = im/2$.

3.13. Так как $\overline{\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2} = \overline{\hat{l}_z^2 - \hat{l}_z^2} = l(l+1) - m^2$, то с учетом результата предыдущей задачи находим

$$\bar{l}_x^2 = \bar{l}_y^2 = [l(l+1) - m^2]/2.$$

3.14. Оператор проекции момента на ось \tilde{z} имеет вид

$$\hat{l}_z = \cos \alpha \cdot \hat{l}_z + \sin \alpha \cos \beta \cdot \hat{l}_x + \sin \alpha \sin \beta \cdot \hat{l}_y, \quad (1)$$

где α, β — полярный и азимутальный углы направления оси \tilde{z} .
Усредняя оператор (1) по состоянию Ψ_{lm} , находим

$$\bar{l}_z = m \cos \alpha$$

(согласно задаче 3.12 $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$).

Учитывая при усреднении оператора \hat{l}_z^2 результаты двух предыдущих задач, легко находим

$$\bar{l}_z^2 = \frac{1}{2} [l(l+1) - m^2] \sin^2 \alpha + m^2 \cos^2 \alpha,$$

$$\overline{(\Delta l_z)^2} = \bar{l}_z^2 - \bar{l}_z^2 = \frac{1}{2} [l(l+1) - m^2] \sin^2 \alpha.$$

3.15. Разложение в.ф. в ряд по нормированным с.ф. $\Psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ оператора \hat{l}_z имеет вид $(\cos \varphi = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2)$

$$\begin{aligned} \Psi(\varphi) &= \frac{A}{2^n} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})^n = \frac{A}{2^n} \sum_{k=0}^n C_n^k e^{i(n-2k)\varphi} = \\ &= \frac{\sqrt{2\pi} A}{2^n} \sum_k C_n^k \Psi_{n-2k}(\varphi), \quad (1) \end{aligned}$$

где $C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$. Определяя $|A|^2$ из условия нормировки в. ф. $\Psi(\varphi)$ на единицу:

$$\begin{aligned} |A|^{-2} &= \int_0^{2\pi} \cos^{2n} \varphi d\varphi = \frac{1}{2^{2n}} \int_0^{2\pi} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})^{2n} d\varphi = \\ &= \frac{1}{2^{2n}} \sum_{k=0}^{2n} C_{2n}^k \int_0^{2\pi} e^{i(2n-2k)\varphi} d\varphi = \frac{2\pi}{2^{2n}} C_{2n}^n = \frac{\pi(2n-1)!!}{2^{n-1}n!} \end{aligned} \quad (2)$$

(в (2) использовано $\int_0^{2\pi} e^{im\varphi} d\varphi = 2\pi\delta_{0,m}$), находим из (1) отлич-

ные от нуля вероятности проекций момента:

$$\begin{aligned} \omega(m) &= \frac{2\pi|A|^2}{2^{2n}} \left[C_n^{\frac{n-m}{2}} \right]^2 = \frac{n!}{2^n(2n-1)!!} \left[C_n^{\frac{n-m}{2}} \right]^2, \\ m &= n, n-2, \dots, -n. \end{aligned}$$

3.16. В разложении нормированной в. ф. по с. ф. Y_{lm} операторов \hat{I}^2 и \hat{I}_z , очевидно, отличны от нуля лишь члены суммы с $m=2$, т. е.

$$\Psi \equiv \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{2i\varphi} = \sum_{l,m} C_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sum_{l=2}^{\infty} C_l Y_{l,2}(\theta, \varphi). \quad (1)$$

Учитывая явный вид шаровых функций ($l \geq 2$)

$$Y_{l,2} = i^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-2)!}{2(l+2)!}} (1-z^2) \frac{d^2}{dz^2} P_l(z) \frac{e^{2i\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad z = \cos \theta,$$

получаем выражение для коэффициентов C_l в разложении (1):

$$C_l = \int \Psi Y_{l,2}^* d\Omega = (-i)^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-2)!}{4(l+2)!}} \int_{-1}^1 (1-z^2) P_l'(z) dz. \quad (2)$$

Интеграл в выражении (2) вычисляется элементарно, если учесть соотношения

$$\begin{aligned} (1-z^2) P_l' &= 2z P_l' - l(l+1) P_l, \quad P_l(1) = P_l(-1) \cdot (-1)^l = 1, \\ \int_{-1}^1 P_l(z) dz &= \delta_{l,0}, \end{aligned}$$

так что вероятность различных значений момента оказывается равной

$$\omega(l) = |C_l|^2 = \frac{(2l+1)(l-2)!}{(l+2)!} [1 + (-1)^l]^2, \quad l \geq 2. \quad (3)$$

3.17. Используя известное соотношение между шаровыми функциями $Y_{lm}^* = (-1)^{l-m} Y_{l,-m}$ и вид оператора $\hat{l}_+ = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$, имеем

$$\hat{l}_+ \sum_m |Y_{lm}|^2 = \sum_m (-1)^{l-m} \{Y_{l,-m} \hat{l}_+ Y_{lm} + Y_{lm} \hat{l}_+ Y_{l,-m}\}. \quad (1)$$

Учтя в (1)

$$\hat{l}_+ Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{(l+m+1)(l-m)} Y_{l, m+1}(\theta, \varphi)$$

и переобозначив во второй сумме выражения (1) индекс суммирования m на $m' = m - 1$, находим, что выражение (1) равно нулю.

Указанная в условии задачи сумма, очевидно, не зависит от φ . Учитывая явный вид \hat{l}_+ и равенство нулю выражения (1), находим, что эта сумма не зависит и от θ , т. е. является постоянной величиной. Значение постоянной находим, положив в сумме $\theta = 0$. Так как

$$|Y_{lm}(\theta = 0, \varphi)|^2 = (2l+1) \delta_{m,0} / 4\pi,$$

то утверждение задачи доказано.

Задачу можно решить также, воспользовавшись теоремой сложения для шаровых функций

$$P_l(\cos \alpha) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi'), \quad (2)$$

где $\cos \alpha = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')$, взяв в (2) $\theta = \theta'$, $\varphi = \varphi'$; при этом $\cos \alpha = 1$, $P_l(1) = 1$.

3.18. Так как при значении момента L проекция момента на ось z принимает конечное число $(2L+1)$ значений $L, L-1, \dots, -L$, то искомым оператор $\hat{P}(M)$ имеет вид (см. 1.40)

$$\hat{P}(M) = \prod_{m=-L}^L{}' \frac{(\hat{L}_z - m)}{(M - m)},$$

где штрих у знака произведения означает отсутствие сомножителя с $m = M$.

3.19. В формуле, описывающей согласно 3.1 преобразование в. ф. в координатном представлении:

$$\Psi'(r, \theta, \varphi) = \exp(i\varphi_0 \hat{L}) \Psi(r, \theta, \varphi), \quad (1)$$

запишем в. ф. в виде (с учетом определенного значения момента l)

$$\Psi' = \sum_m C'_m(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \Psi = \sum_m C_m(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

где C_m, C'_m — в. ф. исходного и преобразованного состояний в l_z -представлении.

Умножив (1) слева на $Y_{im}(\theta, \varphi)$ и проинтегрировав по углам, находим

$$C'_m(r) \equiv \exp(i\varphi_0 \hat{L}) C_m(r) = \sum_{m'=-l}^l [\exp(i\varphi_0 \hat{L})]_{mm'} C_{m'}(r), \quad (2)$$

где $(\hat{L}_i)_{mn}$ — матрица i -й компоненты момента величины l . Соотношения (2) определяют искомый закон преобразования в. ф. (о том, как следует понимать матрицу $(\exp \hat{A})_{mn}$, см. 1.12 и 1.52).

3.20. Из коммутационного соотношения $L_z \hat{f} - \hat{f} L_z = 0$ следует

$$\hat{L}_z (\hat{f} \Psi_M) = M (\hat{f} \Psi_M),$$

т. е. функция $\hat{f} \Psi_M$, как и Ψ_M , является с. ф. L_z , отвечающей тому же с. з. M , и равенство $\langle M' | \hat{f} | M \rangle = 0$ при $M' \neq M$ очевидно.

Используя коммутационное соотношение $[L_+, \hat{f}] = 0$ ($L_+ = L_x + iL_y$), находим

$$\langle n, L, M+1 | \hat{L}_+ \hat{f} | n, L, M \rangle = \langle n, L, M+1 | \hat{f} \hat{L}_+ | n, L, M \rangle. \quad (1)$$

Так как $\hat{L}_+ \Psi_{LM} = \sqrt{(L-M)(L+M+1)} \Psi_{L, M+1}$, $\langle n, L, M+1 | \hat{L}_+ \equiv [\hat{L}_- | n, L, M+1]^\ast = \sqrt{(L-M)(L+M+1)} \times \langle n, L, M |$, то равенство (1) эквивалентно условию $f_{MM} = f_{M+1, M+1}$, что и доказывает независимость диагональных элементов f_{MM} от M .

3.21. Представив произвольную в. ф. в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{l, m} C_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

и учитывая свойство шаровых функций $l Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$, а также связь между в. ф. $\Psi(\mathbf{r})$ в координатном представлении (в данной задаче точнее было бы говорить о представлении угловых переменных, так как радиальная зависимость в. ф. фактически не имеет непосредственного отношения к описанию состояний частицы с точки зрения момента) и C_{lm} в l_z -представлении, легко находим искомое преобразование в. ф.:

$$C'_m(r) = \hat{I} C_{lm}(r) = (-1)^l C_{lm}(r).$$

3.22. Представив шаровую функцию $Y_{10}(\theta, \varphi)$ в виде

$$Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{(\mathbf{k}\mathbf{r})}{r}, \quad k = (0, 0, 1),$$

и учитывая равноправность всех направлений в пространстве, находим

$$\Psi_{\hat{m}=0} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{(\mathbf{n}_0 \mathbf{r})}{r} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \{ \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta) \}$$

(вектор \mathbf{n}_0 направлен вдоль оси \hat{z}).

3.23. Представив шаровые функции $Y_{l, \pm 1}$ в виде

$$Y_{l, \pm 1} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r}$$

и учитывая равноправность различных ориентаций системы координат, находим с помощью циклической перестановки переменных x, y, z

$$\Psi_{l_x, \pm 1} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{y \pm iz}{r} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\sin \theta \sin \varphi \pm i \cos \theta).$$

Вид в. ф. $\Psi_{l_x, 0}$ получается непосредственно из результата предыдущей задачи при выборе $\alpha = \pi/2, \beta = 0$. Совершенно аналогично устанавливается вид в. ф. $\Psi_{l_y}(\theta, \varphi)$.

3.24. а) Обозначим через $\omega(1)$ и $\omega(-1)$ вероятности проекций момента $\tilde{m} = \pm 1$ на указанную в условии задачи ось \tilde{z} . На основании результатов задачи 3.14 имеем

$$\bar{l}_z = \sum_{\tilde{m}} \omega(\tilde{m}) \tilde{m} = \omega(1) - \omega(-1) = m \cos \alpha, \quad (1)$$

$$\bar{l}_z^2 = \sum_{\tilde{m}} \omega(\tilde{m}) \tilde{m}^2 = \omega(1) + \omega(-1) = m^2 + \left(1 - \frac{3m^2}{2}\right) \sin^2 \alpha. \quad (2)$$

Из (1) и (2) легко находим

$$\omega(1, m) \equiv \omega(1) = [2m^2 + 2m \cos \alpha + (2 - 3m^2) \sin^2 \alpha]/4,$$

$$\omega(-1, m) \equiv \omega(-1) = [2m^2 - 2m \cos \alpha + (2 - 3m^2) \sin^2 \alpha]/4,$$

$$\omega(0, m) \equiv 1 - \omega(1) - \omega(-1).$$

б) Решить задачу этим способом предлагается самостоятельно.

3.25. В. ф. $\Psi_{l_i, 0}(\theta, \varphi)$ ($i = 1, 2, 3$) имеют вид

$$\Psi_{l_z, 0} = Y_{l0} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \equiv i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r},$$

$$\Psi_{l_x, 0} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x}{r} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \varphi,$$

$$\Psi_{l_y, 0} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{y}{r} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \varphi,$$

и их независимость и полнота (в указанном в условии задачи смысле) очевидны (в случае $l = 1$ имеется три независимых в. ф. в пространстве угловых переменных θ, φ частицы).

Легко заметить, что различные в. ф. $\Psi_{l_i, 0}$ ортогональны:

$$\int \Psi_{l_i, 0}^*(\theta, \varphi) \Psi_{l_k, 0}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{ik},$$

и поэтому коэффициенты C_l в разложении произвольной (но нормированной) в. ф. $\Psi_{l=1}$, отвечающей моменту частицы $l = 1$,

в ряд по этим функциям $\Psi_{l-1} = \sum_i C_i \Psi_{l_i-0}$ определяют вероятность $\omega(i) = |C_i|^2$ того, что проекция момента частицы на i -ю ось равна нулю.

Отметим, что полученный в задаче результат не имеет никакого отношения к обычному разложению произвольной в. ф. в ряд по с. ф. эрмитова оператора (операторы \hat{l}_i не коммутируют друг с другом).

3.26. Используя стандартные формулы для матричных элементов операторов $(l_i)_{mm'}$ при значении момента $l=1$, находим вид искоемых матриц, являющихся операторами в l_z -представлении, действующими на в. ф. в этом представлении:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \\ \psi_{-1} \end{pmatrix}; \quad \hat{l}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{l}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$\hat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{l}_+^3 = \hat{l}_-^3 = 0.$$

3.27. Уравнение для искомой в. ф. $\hat{l}_x \Psi_{l_x-0} = 0$ в l_z -представлении имеет вид

$$\hat{l}_x \Psi_{l_x-0} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b/\sqrt{2} \\ (a+c)/\sqrt{2} \\ b/\sqrt{2} \end{pmatrix} = 0;$$

$$\Psi_{l_x-0} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}.$$

откуда $b=0$, $a=-c$.

Таким образом, нормированная с. ф. Ψ_{l_x-0} равна $\Psi_{l_x-0} = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$.

3.28. С. з. оператора проекции момента на произвольную ось в случае $l=1$ равны 0, ± 1 , так что, согласно 1.27, имеем

$$\hat{l}_x^3 = \hat{l}_x, \quad \hat{l}_y^3 = \hat{l}_y \quad (1)$$

(при желании соотношения (1) легко проверить в l_z -представлении непосредственным умножением матриц, приведенных в 3.26).

В состоянии с заданными значениями $l = 1$ и $l_z = m$, согласно 3.12 и 3.13, имеем

$$\hat{l}_x = \hat{l}_y = 0, \quad \overline{l_x^2} = \overline{l_y^2} = (2 - m^2)/2. \quad (2)$$

Учитывая (1) и (2), находим

$$\overline{l_x^n} = \overline{l_y^n} = \begin{cases} 0, & n - \text{нечетное,} \\ (2 - m^2)/2, & n - \text{четное } (n > 0). \end{cases}$$

3.29. Оператор $(\mathbf{a}\hat{\mathbf{I}})$ является оператором проекции момента на направление вектора \mathbf{a} (умноженным на величину a), и в случае $l = 1$ его с.з. равны $0, \pm a$. Явный вид оператора \hat{F} следует из результата задачи 1.52:

$$\hat{F} = F(0) + \frac{F(a) - F(-a)}{2a} (\mathbf{a}\hat{\mathbf{I}}) + \frac{F(a) + F(-a) - 2F(0)}{2a^2} (\mathbf{a}\hat{\mathbf{I}})^2.$$

3.30. Учитывая вид оператора $\hat{R}(\varphi_0) = \exp(i\varphi_0\hat{\mathbf{I}})$, на основании результата предыдущей задачи представим его в виде

$$\hat{R}(\varphi_0) = 1 + i \sin \varphi_0 (\mathbf{n}_0 \hat{\mathbf{I}}) - (1 - \cos \varphi_0) (\mathbf{n}_0 \hat{\mathbf{I}})^2 \quad (1)$$

$$(\mathbf{n}_0 = \varphi_0/\varphi_0, \quad \mathbf{n}_0^2 = 1).$$

3.31. Выберем вектор поворота φ_0 системы координат таким, чтобы в результате вращения ось z исходной системы координат (проекция момента на которую имеет определенное значение m) по отношению к осям повернутой системы координат имела бы такую же ориентацию, как и ось \tilde{z} по отношению к исходной системе. При этом в.ф. $\Psi_{\tilde{m}}(\theta, \varphi) = \hat{R}Y_{lm}(\theta, \varphi)$ будет описывать состояние частицы с моментом l и его проекцией m на ось \tilde{z} (направление которой определяется углами α, β) в соответствии со смыслом оператора $\hat{R}(\varphi_0)$ как оператора вращения системы координат.

Легко заметить, что для этого компоненты вектора φ_0 следует выбрать равными $\varphi_0 = (\alpha \sin \beta, -\alpha \cos \beta, 0)$. Учитывая явный вид операторов

$$\hat{l}_x = i \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cos \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

$$\hat{l}_y = -i \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i \sin \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

$$\hat{R}(\varphi_0) = 1 + i \sin \alpha (\hat{l}_x \sin \beta - \hat{l}_y \cos \beta) - (1 - \cos \alpha) (\hat{l}_x \sin \beta - \hat{l}_y \cos \beta)^2$$

и шаровой функции $Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$, находим после простых вычислений

$$\Psi_{\tilde{m}=0}(\theta, \varphi) = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \{ \cos \alpha \cos \theta + \sin \alpha \sin \theta \cos(\varphi - \beta) \}$$

в согласии с результатом задачи 3.22. Аналогично можно найти функции $\Psi_{\tilde{m}=\pm 1}(\theta, \varphi)$.

3.32. Согласно 3.18 находим

$$\hat{P}(0) = 1 - \hat{l}_z^2, \quad \hat{P}(1) = (\hat{l}_z^2 + \hat{l}_z)/2, \quad \hat{P}(-1) = (\hat{l}_z^2 - \hat{l}_z)/2. \quad (1)$$

В l_z -представлении эти операторы имеют вид (см.3.26)

$$\hat{P}(0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}(-1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

в согласии с результатом задачи 1.50.

Легко установить свойства $\hat{P}^2(m) = \hat{P}(m)$ и $\sum_m \hat{P}(m) = \hat{1}$.

Действие оператора $\hat{P}(m)$ на произвольную в. ф. приводит, вообще говоря, к функции, являющейся с. ф. оператора \hat{l}_z , отвечающей с. з. m (или дает $\hat{P}(m)\Psi \equiv 0$). Так, например,

$$\hat{P}(0)\Psi \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{так что } \Psi_{m=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

3.33. Проекционные операторы $\hat{P}(\tilde{m})$ получаются непосредственно из выражений (1) предыдущей задачи заменой в них оператора \hat{l}_z на оператор проекции момента на ось \tilde{z} , направление \mathbf{n}_0 которой в пространстве определяется полярным α и азимутальным β углами:

$$\hat{l}_z = \mathbf{n}_0 \hat{1} = \cos \alpha \hat{l}_z + \sin \alpha \cos \beta \hat{l}_x + \sin \alpha \sin \beta \hat{l}_y.$$

В частности, оператор $\hat{P}(\tilde{m} = 0)$ в l_z -представлении имеет вид

$$\hat{P}(\tilde{m} = 0) = \begin{pmatrix} (\sin^2 \alpha)/2 & -e^{-i\beta} (\sin 2\alpha)/2\sqrt{2} & -e^{-2i\beta} (\sin^2 \alpha)/2 \\ -e^{i\beta} (\sin 2\alpha)/2\sqrt{2} & \cos^2 \alpha & e^{-i\beta} (\sin 2\alpha)/2\sqrt{2} \\ -e^{2i\beta} (\sin^2 \alpha)/2 & e^{i\beta} (\sin 2\alpha)/2\sqrt{2} & (\sin^2 \alpha)/2 \end{pmatrix}.$$

Поддействовав этим оператором на произвольную функцию (которую удобно выбрать в виде, например, $\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$), находим с. ф. $\Psi_{\tilde{m}=0}$ оператора \hat{l}_z , отвечающую с. з. $\tilde{m} = 0$:

$$\Psi_{\tilde{m}=0} = \begin{pmatrix} (\sin \alpha)/\sqrt{2} \\ -e^{i\beta} \cos \alpha \\ -e^{2i\beta} (\sin \alpha)/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Аналогично можно найти вид в. ф. $\Psi_{\tilde{m}=0}(0, \varphi)$ частицы в пространстве угловых переменных, поддействовав проекционным оператором $\hat{P}(\tilde{m} = 0)$ на какую-либо в. ф., отвечающую моменту $l = 1$ частицы (например, $Y_{10}(\theta, \varphi)$).

3.34. Обозначив через $\Psi_{Ll_1l_2}$ с. ф. операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{I}}_1^2$, $\hat{\mathbf{I}}_2$, легко находим

$$\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{I}}_2\Psi_{Ll_1l_2} = \frac{L(L+1) - l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1)}{2} \Psi_{Ll_1l_2},$$

$$\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{L}}\Psi_{Ll_1l_2} = \frac{L(L+1) + l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1)}{2} \Psi_{Ll_1l_2},$$

$$\hat{\mathbf{I}}_2\hat{\mathbf{L}}\Psi_{Ll_1l_2} = \frac{L(L+1) + l_2(l_2+1) - l_1(l_1+1)}{2} \Psi_{Ll_1l_2}.$$

3.35. Обозначив $\hat{\mathbf{V}} = [\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{I}}_2]$, легко убеждаемся, что операторы компонент этого вектора $\hat{V}_i = \varepsilon_{ikl}\hat{l}_{1k}\hat{l}_{2l}$ являются эрмитовыми. Учитывая коммутационные соотношения для операторов компонент момента $[\hat{l}_i, \hat{l}_k] = i\varepsilon_{ikl}\hat{l}_l$ и равенство $\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{\alpha\beta l} = \delta_{i\alpha}\delta_{k\beta} - \delta_{i\beta}\delta_{k\alpha}$, находим после простых преобразований вид оператора $\hat{\mathbf{V}}^2$:

$$\hat{\mathbf{V}}^2 = \hat{V}_i\hat{V}_i = \hat{\mathbf{I}}_1^2\hat{\mathbf{I}}_2^2 - (\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{I}}_2)^2 - (\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{I}}_2). \quad (1)$$

С.з. этого оператора с учетом результата предыдущей задачи представляются очевидными, и мы их не выписываем.

Если же исходить из тождества $[\mathbf{ab}]^2 = \mathbf{a}^2\mathbf{b}^2 - (\mathbf{ab})^2$, справедливо для обычных (неоператорных) векторов, то можно было бы определить оператор $\hat{\mathbf{V}}^2$ следующим образом:

$$\hat{\mathbf{V}}^{2'} = \hat{\mathbf{I}}_1^2\hat{\mathbf{I}}_2^2 - (\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{I}}_2)^2, \quad (2)$$

что отличается от выражения (1).

Различие (1) и (2) показывает, что однозначного соответствия квантовомеханического оператора классической физической величине, вообще говоря, не существует.

3.36. Указанные коммутаторы вычисляются точно так же, как и в 3.4, и их структура имеет точно такой же вид, т. е.: в случае а) коммутаторы равны нулю, в случае б) $[\hat{L}_i, \hat{l}_k] = i\varepsilon_{ikl}\hat{l}_l$ и т. д.

3.37. Возможные значения момента L совокупной системы удовлетворяют условиям

$$\max\{|l_1 - l_2|, |m_1 + m_2|\} \leq L \leq l_1 + l_2.$$

Учитывая коммутативность операторов \hat{l}_{1i} и \hat{l}_{2k} и равенство нулю средних значений $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$ в состояниях с определенным значением l_z (см., например, 3.12), легко находим искомые средние ($\overline{\hat{\mathbf{L}}^2} = \hat{\mathbf{I}}_1^2 + \hat{\mathbf{I}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{I}}_2$):

$$\bar{L}_x = \bar{L}_y = 0, \quad \bar{L}_z = m_1 + m_2, \quad (1)$$

$$\overline{\hat{\mathbf{L}}^2} = l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) + 2m_1m_2. \quad (2)$$

3.38. Возможные значения суммарного момента L суть $l_1 + l_2$ и $l_1 + l_2 - 1$. Обозначим через $\omega(L)$ вероятность значения L суммарного момента. Учитывая соотношение $\omega(l_1 + l_2) +$

$+ \omega(l_1 + l_2 - 1) = 1$ и результат предыдущей задачи, представим $\widehat{\mathbf{L}}^2$ в виде

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{L}}^2 &= \sum_L L(L+1) \omega(L) = (l_1 + l_2)(l_1 + l_2 + 1) \omega(l_1 + l_2) + \\ &+ (l_1 + l_2 - 1)(l_1 + l_2) [1 - \omega(l_1 + l_2)] = \\ &= l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) + 2l_1(l_2 - 1). \end{aligned} \quad (1)$$

Из (1) следует

$$\omega(l_1 + l_2) = \frac{l_2}{l_1 + l_2}, \quad \omega(l_1 + l_2 - 1) = \frac{l_1}{l_1 + l_2}. \quad (2)$$

3.39. Пусть функция $\Psi_{LM}(m_1, m_2)$ отвечает определенному значению L суммарного момента и его проекции M на ось z (очевидно, она отлична от нуля лишь при $m_1 + m_2 = M$).

Рассмотрим функцию $\tilde{\Psi}(m_1, m_2) \equiv \Psi_{LM}(m_2, m_1)$. В силу симметричности операторов $\widehat{\mathbf{L}}^2$ и \mathcal{L}_z ($\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{L}}_1 + \widehat{\mathbf{L}}_2$) по отношению к взаимной перестановке $\widehat{\mathbf{L}}_1$ и $\widehat{\mathbf{L}}_2$ и универсального вида операторов l_i компонент момента в l_2 -представлении (при определенном значении l) очевидно, что функция $\tilde{\Psi}$ также является с. ф. операторов $\widehat{\mathbf{L}}^2$ и \mathcal{L}_z , отвечающей тем же с. з. L, M . Известно, однако, что при сложении двух моментов l_1 и l_2 в результирующий момент L состояние с определенными значениями L и M может быть получено единственным способом (если такие L и M вообще возможны). Это означает, что $\tilde{\Psi}(m_1, m_2) = C \Psi_{LM}(m_1, m_2)$, и, переставив еще раз местами переменные m_1 и m_2 , находим $C^2 = 1$, т. е. $C = \pm 1$.

Для выяснения характера симметрии в. ф. при различных значениях L можно поступить следующим образом. Рассмотрим в. ф., отвечающую $L = 2l$ и $M = 2l$, $\Psi_{L=2l, M=2l}(m_1, m_2) = \delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l}$. Эта функция, очевидно, симметрична по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 . Очевидно также, что характер симметрии в. ф. зависит от значения L и не зависит от M (так как при вращениях системы координат в. ф. с различными значениями M и одинаковым L преобразуются друг через друга; более формально это утверждение можно доказать с помощью оператора \mathcal{L}_- :

$$\Psi_{L, M=L-n} = C \widehat{\mathbf{L}}_-^n \Psi_{L, M=L}$$

учитывая его симметричность по отношению к перестановке складываемых моментов: $\mathcal{L}_- = l_{1x} + l_{2x} - i l_{1y} - i l_{2y}$). Таким образом, в. ф. состояния с моментом $2l$ и $M = 2l - 1$ также симметрична и поэтому имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi_{2l, 2l-1}(m_1, m_2) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_{l_{1z}=l}^{(1)}(m_1) \Psi_{l_{2z}=l-1}^{(2)}(m_2) + \Psi_{l_{1z}=l-1}^{(1)}(m_1) \Psi_{l_{2z}=l}^{(2)}(m_2) \} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l-1} + \delta_{m_1, l-1} \delta_{m_2, l} \}. \end{aligned} \quad (1)$$

Далее, наиболее общий вид функции $\Psi_{2l-1, 2l-1}(m_1, m_2)$ следующий:

$$\Psi_{2l-1, 2l-1}(m_1, m_2) = \alpha \delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l-1} + \beta \delta_{m_1, l-1} \delta_{m_2, l}, \quad (2)$$

и, учитывая ее ортогональность к в. ф. (1), находим $\alpha = -\beta$, т. е. функция, отвечающая моменту $L = 2l - 1$, антисимметрична.

Расписав, далее, аналогично (1) и (2) функции, отвечающие $M = 2l - 2$ и $L = 2l, 2l - 1, 2l - 2$, и учитывая установленный выше характер симметрии функций с $L = 2l, 2l - 1$, легко находим, что в. ф. состояния с $L = 2l - 2$ симметрична по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 .

Продолжая такое рассмотрение дальше, можно прийти к выводу, что в. ф. состояний с данным значением L имеют следующую симметрию:

$L = 2l, 2l - 2, 2l - 4, \dots$ — симметричные в. ф.,

$L = 2l - 1, 2l - 3, \dots$ — антисимметричные в. ф.

Отметим, что при решении задачи не использовалось конкретное значение момента l . Установленный характер симметрии в. ф. имеет место как при целочисленных значениях l , так и при полуцелых, появляющихся при рассмотрении спина частиц (см. гл. 5).

3.40. Представив нормированную в. ф. рассматриваемого состояния в $l_{1z}l_{2z}$ -представлении $\Psi = \delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l-1}$ в виде

$$\Psi = \frac{1}{2} \{ (\delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l-1} + \delta_{m_1, l-1} \delta_{m_2, l}) + (\delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l-1} - \delta_{m_1, l-1} \delta_{m_2, l}) \}$$

и учитывая характер симметрии в. ф. при различных L по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 , установленный в предыдущей задаче, находим, что вероятности двух возможных в условиях данной задачи значений момента $L = 2l, 2l - 1$ одинаковы и равны $\omega(2l) = \omega(2l - 1) = 1/2$.

3.41. Нормированные в. ф. указанных в условии состояний в $l_{1z}l_{2z}$ -представлении, согласно 3.39, имеют вид

$$\Psi_{L=2l, M=2l-1}(m_1, m_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l-1} + \delta_{m_1, l-1} \delta_{m_2, l} \}, \quad (1)$$

$$\Psi_{L=2l-1, M=2l-1}(m_1, m_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \delta_{m_1, l} \delta_{m_2, l-1} - \delta_{m_1, l-1} \delta_{m_2, l} \}. \quad (2)$$

Из (1) и (2) непосредственно следует, что в рассматриваемых состояниях проекции на ось z складываемых моментов могут принимать лишь значения l и $l - 1$ и вероятности этих значений одинаковы и равны $1/2$.

3.42. В. ф. рассматриваемого состояния $\Psi = \delta_{m_1, 0} \delta_{m_2, 0}$ (в $l_{1z}l_{2z}$ -представлении) симметрична по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 , и согласно 3.39 в этом состоянии

суммарный момент может принимать лишь два значения $L = 0$; 2. Вероятности этих значений L вычисляются совершенно аналогично тому, как это было сделано при решении 3.38, и равны $\omega(L=2) = 2/3$, $\omega(L=0) = 1/3$.

В случае произвольного значения l и $l_{1z} = l_{2z} = l - 1$ вероятности возможных значений $L = 2l$, $2l - 2$ суммарного момента равны

$$\omega(L=2l) = 2l/(4l-1), \quad \omega(L=2l-2) = \frac{2l-1}{4l-1}.$$

3.43. Нормированную в. ф. рассматриваемого состояния представим в виде (в $l_{1z}l_{2z}$ -представлении)

$$\Psi = \delta_{m_1, 1} \delta_{m_2, -1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} (\delta_{m_1, 1} \delta_{m_2, -1} + \delta_{m_1, -1} \delta_{m_2, 1}) + \frac{1}{\sqrt{2}} (\delta_{m_1, 1} \delta_{m_2, -1} - \delta_{m_1, -1} \delta_{m_2, 1}) \right\}. \quad (1)$$

Возможные значения суммарного момента равны $L = 0, 1, 2$. Учитывая характер симметрии в. ф. состояния с определенным значением L по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 , установленный в 3.39, замечаем, что второе слагаемое в фигурных скобках выражения (1) представляет нормированную в. ф. состояния с $L = 1$, а первое описывает суперпозицию состояний с $L = 2$ и $L = 0$. Очевидно, вероятность значения $L = 1$ равна $\omega(L=1) = 1/2$ и $\omega(L=0) = 1/2 - \omega(L=2)$. Записав $\overline{L^2}$:

$$\overline{L^2} = \sum_L L(L+1) \omega(L) = 6\omega(L=2) + 1,$$

и учитывая, что, согласно 3.37, это среднее значение равно $\overline{L^2} = 2$, находим

$$\omega(L=2) = 1/6, \quad \omega(L=1) = 1/2, \quad \omega(L=0) = 1/3.$$

Обобщение на случай произвольных значений l , указанный в условии задачи, дает

$$\omega(L=2l) = \frac{2l-1}{8l-2}, \quad \omega(L=2l-1) = \frac{1}{2},$$

$$\omega(L=2l-2) = \frac{l}{4l-1}.$$

3.44. Утверждение задачи является непосредственным следствием двух очевидных обстоятельств:

а) в силу определенной симметрии в. ф. $\Psi_{LM}(m_1, m_2)$ по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 вероятности одного и того же значения m для обоих моментов одинаковы, т. е.

$$\omega_1(m) = \omega_2(m) \equiv \omega(m) \quad (1)$$

($\omega_{1,2}$ — функции распределения по проекциям 1-го и 2-го моментов);

б) в состоянии, описываемом в. ф. $\Psi_{LM}(m_1, m_2)$, проекции m_1 и m_2 однозначно связаны друг с другом, так как $m_1 + m_2 = M$, и поэтому вероятность значения m_1 для первого момента равна вероятности значения $m_2 = M - m_1$ для второго, т. е.

$$\omega_1(m_1) = \omega_2(M - m_1). \quad (2)$$

Из (1) и (2) следует утверждение задачи:

$$\omega_{1,2}(m) = \omega_{1,2}(M - m).$$

3.45. Учитывая симметричность в. ф. $\Psi = \delta_{m_1, 0} \delta_{m_2, 0}$ рассматриваемого состояния по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 , находим, что возможные значения суммарного момента L равны $L = 0, 2, 4$. Вероятности $\omega(L)$ этих значений L удовлетворяют условию

$$\omega(L=0) + \omega(L=2) + \omega(L=4) = 1, \quad (1)$$

а $\overline{L^2}$, согласно 3.37, равно

$$\overline{L^2} = 20\omega(L=4) + 6\omega(L=2) = 12. \quad (2)$$

Из условий (1) и (2) нетрудно получить следующие ограничения на вероятности ($\omega(L) \geq 0$):

$$\begin{aligned} 3/7 \leq \omega(L=4) \leq 3/5, \quad 0 \leq \omega(L=2) \leq 4/7, \\ 0 \leq \omega(L=0) \leq 2/5. \end{aligned}$$

Точные значения этих вероятностей могут быть найдены с помощью коэффициентов Клебша — Гордана и равны

$$\omega(L=0) = 1/5, \quad \omega(L=2) = 2/7 \quad \text{и} \quad \omega(L=4) = 18/35.$$

3.46. В. ф. состояния с $L=0$ представляется в виде

$$\Psi_{L=0} = \sum_{m=-l}^l C_m \Psi_m^{(1)} \Psi_{-m}^{(2)}, \quad (1)$$

где $\Psi_m^{(1,2)}$ — нормированные на единицу в. ф. состояний систем с моментом l и его проекцией m на ось z . Действие оператора $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hat{l}_{1+} + \hat{l}_{2+}$ на функцию (1) должно давать, очевидно,

$$\hat{L}_+ \Psi_{L=0} = (\hat{l}_{1+} + \hat{l}_{2+}) \Psi_{L=0} = 0. \quad (2)$$

Учитывая соотношение

$$\hat{l}_+ \Psi_m = \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \Psi_{m+1},$$

из равенства (2) после простых преобразований находим

$$\hat{L}_+ \Psi_{L=0} = \sum_m \sqrt{(l-m)(l+m+1)} (C_m + C_{m+1}) \Psi_{m+1}^{(1)} \Psi_{-m}^{(2)} = 0,$$

т. е. $C_{m+1} = -C_m$, так что $|C_m| = \text{const} = 1/\sqrt{2l+1}$ — из условия нормировки в. ф. $\Psi_{L=0}$ на единицу.

Таким образом, в состоянии с суммарным моментом $L=0$ вероятности различных значений проекций складываемых моментов на ось z одинаковы и равны $\omega = (2l+1)^{-1}$. В силу сферической симметрии состояния с $L=0$ и эквивалентности различных направлений в пространстве вероятность любого значения проекции каждого из складываемых моментов $(l, l-1, \dots, -l)$ на произвольную ось также равна $(2l+1)^{-1}$.

3.47. Найдем вид нормированных функций Ψ_{LM} в $l_1z_1l_2z_2$ -представлении. Очевидно,

$$\Psi_{2,2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \quad \Psi_{2,-2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \quad (1)$$

(здесь и ниже столбцы $\Psi_{1(2)} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \\ c_{-1} \end{pmatrix}_{1(2)}$ представляют в. ф. 1 (2) частицы (или подсистемы) с моментом $l=1$ в ее l_z -представлении).

Вид в. ф. Ψ_{LM} , отвечающих состояниям с $L=1, 2$ и $M=\pm 1$, а также $L=1, M=0$, непосредственно следует из характера симметрии в. ф. по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 , установленного в 3.39:

$$\Psi_{2(1),1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \pm \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}, \quad (2)$$

$$\Psi_{2(1),-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \pm \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \right\}, \quad (3)$$

$$\Psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}. \quad (4)$$

Знак «+» в выражениях (2) и (3) отвечает $L=2$, знак «-» относится к $L=1$.

Вид в. ф. $\Psi_{0,0}$ следует из результата предыдущей задачи:

$$\Psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}. \quad (5)$$

В. ф. $\Psi_{2,0}$ при учете ее свойства симметрии по отношению к перестановке переменных m_1 и m_2 можно записать в виде

$$\Psi_{2,0} = C_1 \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} + C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2. \quad (6)$$

Из условия ортогональности в. ф. $\Psi_{2,0}$ и $\Psi_{0,0}$ находим, что $C_2 = 2C_1$, и, выбрав в (6) $C_1 = 1/\sqrt{6}$, $C_2 = 2/\sqrt{6}$, получаем нормированную в. ф. $\Psi_{2,0}$.

Вероятности различных проекций складываемых моментов на ось z в состояниях Ψ_{LM} легко находятся из установленного вида (1)–(6) в. ф. Ψ_{LM} .

Для нахождения угловой зависимости в. ф. $\Psi_{LM}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2)$ системы из двух частиц, имеющих моменты $l_1 = l_2 = 1$, воспользуемся соотношением

$$\Psi_{LM}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) = \sum_{m_1, m_2} \Psi_{LM}(m_1, m_2) Y_{1m_1}(\theta_1, \varphi_1) Y_{1m_2}(\theta_2, \varphi_2), \quad (7)$$

связывающим представление угловых переменных с $l_1 z l_2 z$ -представлением. Учитывая вид (5) в. ф. состояния с $L = 0$ в $l_1 z l_2 z$ -представлении и конкретный вид шаровых функций $Y_{1m}(\theta, \varphi)$ (эти функции приведены в решениях задач 3.22 и 3.23), согласно (7) получаем после простых преобразований угловую зависимость в. ф. состояния с $L = 0$:

$$\Psi_{L=0} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \{ \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} (\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) \quad (8)$$

$(\mathbf{n} = \mathbf{r}/r).$

3.48. Всего имеется $3 \cdot 3 \cdot (2l + 1) = 9(2l + 1)$ различных состояний системы. Эти состояния следующим образом классифицируются по возможным значениям L суммарного момента системы:

$$\begin{array}{llll} (2l + 5) \text{ состояний} & \text{отвечают} & L = l + 2, \\ 2(2l + 3) & \text{»} & \text{»} & L = l + 1, \\ 3(2l + 1) & \text{»} & \text{»} & L = l, \\ 2(2l - 1) & \text{»} & \text{»} & L = l - 1, \\ (2l - 3) & \text{»} & \text{»} & L = l - 2. \end{array} \quad (1)$$

Для решения задачи удобно сначала сложить моменты двух подсистем, имеющих $l = 1$, в их результирующий момент L_{12} , принимающий значения $L_{12} = 0, 1, 2$, а затем сложить моменты L_{12} и $l_3 = l$ в суммарный момент L всей системы. При этом следует учесть, что данное значение L можно получить, вообще говоря, несколькими способами. Так, значение $L = l + 1$ можно получить путем сложения с моментом l третьей подсистемы как момента $L_{12} = 1$, так и $L_{12} = 2$.

При получении (1) считалось, что $l \geq 2$. Случай $l = 1$ читателю предлагается рассмотреть самостоятельно.

3.49. Учитывая, что с. з. оператора $2\hat{l}_1 \hat{l}_2 + l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1)$ равны $L(L + 1)$, где L — значение суммарного момента, найдем проекционный оператор $\hat{P}(L)$ (сравнить с задачей 1.40):

$$\hat{P}(L) = \prod_{L'}' \frac{2\hat{l}_1 \hat{l}_2 + l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) - L'(L' + 1)}{L(L + 1) - L'(L' + 1)}, \quad (1)$$

где произведение берется по всем значениям L' , удовлетворяющим условию $|l_1 - l_2| \leq L' \leq l_1 + l_2$, за исключением $L' = L$, на что указывает штрих у символа произведения.

3.50. Очевидно, проекционный оператор $\hat{P}(L, M)$ можно представить в виде $\hat{P}(L, M) = \hat{P}(M)\hat{P}(L)$, где $\hat{P}(L)$ — проекционный оператор на состояния с заданным значением L суммарного момента, найденный в 3.49, а $\hat{P}(M)$ — проекционный оператор на состояния с определенной проекцией M суммарного момента $\hat{L}_z = \hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z}$ на ось z . Как легко сообразить, $\hat{P}(M)$ имеет вид

$$\hat{P}(M) = \prod'_m \frac{(\hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z} - m)}{(M - m)},$$

где произведение берется по значениям m , удовлетворяющим условиям $-L \leq m \leq L$, за исключением $m = M$.

3.51. В случае $l_1 = l_2 = 1$ проекционный оператор $\hat{P}(L = 0)$, согласно формуле (1) задачи 3.49, имеет вид

$$\hat{P}(L = 0) = \frac{(\hat{l}_1 \hat{l}_2)^2 - 1}{3}.$$

Поддействовав этим оператором на произвольную в. ф. Ψ состояния двух систем с моментами $l_1 = l_2 = 1$, получим (ненормированную) с. ф. оператора суммарного момента, отвечающую $L = 0$, т. е.

$$\Psi_{L=0} = C \hat{P}(L = 0) \Psi$$

(C — нормировочный коэффициент).

Представив оператор $\hat{l}_1 \hat{l}_2$ в виде

$$\hat{l}_1 \hat{l}_2 = \hat{l}_{1z} \hat{l}_{2z} + (\hat{l}_{1+} \hat{l}_{2-} + \hat{l}_{1-} \hat{l}_{2+})/2,$$

где \hat{l}_{\pm} — повышающие и понижающие операторы, и выбрав для удобства в. ф. Ψ в виде (в $l_{1z} l_{2z}$ -представлении)

$$\Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2,$$

находим после простых преобразований

$$\begin{aligned} \Psi_{L=0} &= C \hat{P}(L = 0) \Psi = C \hat{P}(L = 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = \\ &= \frac{C}{3} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}. \end{aligned}$$

Выбрав в последнем выражение $C = \sqrt{3}$, получим нормированную в. ф. состояния с $L = 0$ в согласии с результатом задачи 3.47.

3.52. Из коммутационного соотношения $L_z \hat{f}_z - \hat{f}_z L_z = 0$ следует, что недиагональные матричные элементы оператора \hat{f}_z

равны нулю:

$$\langle L, M', n | \hat{L}_z \hat{f}_z - \hat{f}_z \hat{L}_z | L, M, n \rangle = (M' - M) \langle L, M', n | \hat{f}_z | L, M, n \rangle = 0$$

(как и матричные элементы оператора L_z).

Из коммутационных соотношений

$$[\hat{L}_z, \hat{f}_\pm] = \pm \hat{f}_\pm \quad (\hat{f}_\pm \equiv \hat{f}_x \pm i \hat{f}_y)$$

непосредственно вытекает

$$(M' - M) \langle nLM' | \hat{f}_\pm | nLM \rangle = \pm \langle nLM' | \hat{f}_\pm | nLM \rangle. \quad (1)$$

Из (1) следует, что оператор \hat{f}_+ имеет отличные от нуля матричные элементы $(\hat{f}_+)_{M'M}$ лишь при $M' = M + 1$, а $(\hat{f}_-)_{M'M}$ отличны от нуля лишь при $M' = M - 1$ (аналогично свойствам $(L_\pm)_{M'M}$).

Взяв матричный элемент вида $\langle n, L, M + 2 | \dots | n, L, M \rangle$ от обеих частей операторного равенства $[\hat{L}_+, \hat{f}_+] = 0$ (являющегося непосредственным следствием коммутационных соотношений для операторов \hat{L}_i и \hat{f}_k) и учитывая соотношения

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ | n, L, M \rangle &= \sqrt{(L - M)(L + M + 1)} | n, L, M + 1 \rangle, \\ \langle n, L, M | \hat{L}_+ &= \sqrt{(L - M + 1)(L + M)} \langle n, L, M - 1 |, \end{aligned} \quad (2)$$

легко находим

$$\frac{(\hat{f}_+)_{M+2, M+1}}{(\hat{f}_+)_{M+1, M}} = \frac{\sqrt{(L - M - 1)(L + M + 2)}}{\sqrt{(L - M)(L + M + 1)}} = \frac{(L_+)_{M+2, M+1}}{(L_+)_{M+1, M}}. \quad (3)$$

Из (3) следует

$$(\hat{f}_+)_{M+1, M} = a(n, L) (L_+)_{M+1, M}, \quad (4)$$

и, учитывая сказанное выше о матричных элементах операторов \hat{f}_+ и \hat{L}_+ , заключаем, что (4) эквивалентно «условному» равенству (в указанном в условии задачи смысле)

$$\hat{f}_+ \doteq a(n, L) \hat{L}_+. \quad (5)$$

Совершенно аналогично из условия $[\hat{L}_-, \hat{f}_-] = 0$ находим

$$\hat{f}_- \doteq b(n, L) \hat{L}_-. \quad (6)$$

Взяв диагональный матричный элемент от обеих частей операторного равенства $[\hat{L}_-, \hat{f}_+] = -2\hat{f}_z$, легко находим $(\hat{f}_z)_{MM} = a(n, L)M$, т. е.

$$\hat{f}_z \doteq a(n, L) \hat{L}_z. \quad (7)$$

Аналогично из соотношения $[\hat{L}_+, \hat{f}_-] = 2\hat{f}_z$ следует $(\hat{f}_z)_{MM} = b(n, L)M$, что доказывает равенство $a(n, L) = b(n, L)$, так что выражения (5) — (7) можно записать в виде

$$\hat{\mathbf{f}} \doteq a(n, L) \hat{\mathbf{L}}. \quad (8)$$

Для нахождения величины $a(n, L)$ рассмотрим диагональный матричный элемент оператора $(\hat{\mathbf{f}}\hat{\mathbf{L}})$ (так как оператор $(\hat{\mathbf{f}}\hat{\mathbf{L}})$ — оператор скалярной величины, он коммутирует с \hat{L}_i и его диагональные элементы не зависят от M , см. 3.20).

Непосредственное вычисление дает

$$\langle nLM | (\hat{\mathbf{f}}\hat{\mathbf{L}}) | nLM \rangle = a(n, L) \langle nLM | \hat{\mathbf{L}}^2 | nLM \rangle = a(n, L) L(L+1),$$

откуда

$$a(n, L) = \frac{\langle nLM | (\hat{\mathbf{f}}\hat{\mathbf{L}}) | nLM \rangle}{L(L+1)}. \quad (9)$$

3.53. Согласно предыдущей задаче имеем

$$\langle nLM' | [\hat{\mathbf{I}}_1 \hat{\mathbf{I}}_2] | nLM \rangle = a(n, L) (\hat{\mathbf{L}})_{M'M},$$

где

$$a(n, L) = \langle nLM | ([\hat{\mathbf{I}}_1 \hat{\mathbf{I}}_2] \hat{\mathbf{L}}) | nLM \rangle / L(L+1).$$

Так как $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{I}}_1 + \hat{\mathbf{I}}_2$, то, учитывая коммутационные соотношения $[l_i, l_k] = i\epsilon_{ikn} l_n$ для операторов компонент каждого из моментов $\hat{\mathbf{I}}_1, \hat{\mathbf{I}}_2$ и коммутативность l_{1i} и l_{2k} друг с другом, легко находим $a = 0$, т. е. все матричные элементы оператора $[\hat{\mathbf{I}}_1 \hat{\mathbf{I}}_2]$ между состояниями, отвечающими одному и тому же значению L суммарного момента системы, равны нулю.

3.54. На основании результатов задач 3.52 и 3.34 имеем

$$\bar{\mathbf{I}}_1 \equiv \langle nLM | \hat{\mathbf{I}}_1 | nLM \rangle = a_1 \hat{\mathbf{L}}, \quad a_1 = \frac{L(L+1) + l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1)}{2L(L+1)}.$$

Аналогичное выражение (с заменой индекса 1 на 2 и наоборот) имеет место для $\bar{\mathbf{I}}_2$.

Учитывая, что в состоянии с определенным значением M средние значения \bar{L}_x, \bar{L}_y равны нулю, находим

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_x &= 0, \quad \bar{\mu}_y = 0, \\ \bar{\mu}_z &= \frac{(g_1 + g_2)L(L+1) + (g_1 - g_2)[l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1)]}{2L(L+1)} M. \end{aligned} \quad (1)$$

3.55. В данной задаче будем понимать под L его конкретное значение $L = l_1 + l_2$. Очевиден вид в. ф. $\Psi_{L, M=L}$:

$$\Psi_{LL} = \Psi_{l_1 l_1}^{(1)} \Psi_{l_2 l_2}^{(2)}. \quad (1)$$

Учитывая свойство оператора \hat{L}_- :

$$\hat{L}_- \Psi_{LM} = \sqrt{(L-M+1)(L+M)} \Psi_{L, M-1}, \quad (2)$$

имеем

$$\Psi_{LM} = \left[\frac{(L+M)!}{(L-M)!(2L)!} \right]^{1/2} (\hat{L}_-)^{L-M} \Psi_{LL}. \quad (3)$$

Так как $\hat{L}_- = \hat{l}_{1-} + \hat{l}_{2-}$ и операторы \hat{l}_{1-} и \hat{l}_{2-} коммутируют друг с другом, то, учитывая явный вид в. ф. (1) и свойство (2),

легко находим из (3)

$$\begin{aligned} \Psi_{LM} &= G(L, M) \sum_m C_{L-M}^m (\hat{l}_{1-})^m (\hat{l}_{2-})^{L-M-m} \Psi_{l_1 l_1}^{(1)} \Psi_{l_2 l_2}^{(2)} = \\ &= G(L, M) \sum_m C_{L-M}^m G^{-1}(l_1, l_1 - m) G^{-1}(l_2, M + m - l_1) \times \\ &\times \Psi_{l_1, l_1 - m}^{(1)} \Psi_{l_2, l_2 - L + M + m}^{(2)} \equiv \sum_{m_1} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM} \Psi_{l_1 m_1}^{(1)} \Psi_{l_2 m_2}^{(2)} \quad (M = m_1 + m_2), \quad (4) \end{aligned}$$

где введены обозначения

$$G(L, M) = \left[\frac{(L+M)!}{(L-M)!(2L)!} \right]^{1/2}, \quad C_L^m = \frac{L!}{m!(L-m)!}. \quad (5)$$

Из (4) следует значение коэффициентов Клебша — Гордана:

$$C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM} = G(L, M) G^{-1}(l_1, m_1) G^{-1}(l_2, m_2) C_{L-M}^{l_1 - m_1} \quad (M = m_1 + m_2).$$

Учитывая (5), находим окончательное выражение:

$$C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM} = \left[\frac{(2l_1)!(2l_2)!(L+M)!(L-M)!}{(2L)!(l_1+m_1)!(l_1-m_1)!(l_2+m_2)!(l_2-m_2)!} \right]^{1/2}, \quad L = l_1 + l_2.$$

3.56. Коэффициенты Клебша — Гордана для этого случая были фактически найдены в 3.46. Выбрав коэффициент C_m в решении указанной задачи при $m = l$ равным $C_l = (2l+1)^{-1/2}$, находим

$$C_{l, m, l, -m}^{00} = C_m = \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}}.$$

3.57. Рассмотрим в. ф. вида

$$\tilde{\Psi}_l = \varepsilon_{ik \dots n} x_i x_k \dots x_n \equiv \varepsilon_{ik \dots n} n_i n_k \dots n_n r^l.$$

Учитывая, что оператор квадрата момента частицы $\hat{\mathbf{I}}^2$ пропорционален угловой части оператора Лапласа в сферических переменных, точнее,

$$\hat{\mathbf{I}}^2 = -r^2 \Delta_{\theta, \varphi} = r^2 (\Delta_r - \Delta), \quad \Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}, \quad (1)$$

находим

$$\begin{aligned} r^2 \Delta_r \tilde{\Psi}_l &= r^2 \varepsilon_{ik \dots n} n_i n_k \dots n_n \Delta_r r^l = l(l+1) \tilde{\Psi}_l, \\ \Delta \tilde{\Psi}_l &= (\partial/\partial x_m) (\partial/\partial x_m) \varepsilon_{ikp \dots n} x_i x_k x_p \dots x_n = \\ &= \varepsilon_{ikp \dots n} (\delta_{im} \delta_{km} x_p \dots x_n + \dots) = \varepsilon_{mmp \dots n} x_p \dots x_n + \dots = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Из (1) и (2) непосредственно следует

$$\hat{\mathbf{I}}^2 \tilde{\Psi}_l = l(l+1) \tilde{\Psi}_l.$$

Очевидно, в. ф. Ψ_l , указанная в условии задачи, также является с. ф. оператора $\hat{\mathbf{I}}^2$.

3.58. Сначала найдем число независимых компонент $\tilde{g}(l)$ тензора l -го ранга $\tilde{\varepsilon}_{ik \dots n}$, симметричного по любой паре индек-

сов. Обозначим: n_1 — число индексов некоторой компоненты этого тензора, равных 1, n_2 — равных 2 и $n_3 = (l - n_1 - n_2)$ — равных 3. В силу симметричности тензора его компоненты с одинаковыми числами n_1 и n_2 равны и отличаются друг от друга при различных n_1 и n_2 . При фиксированном значении n_1 число n_2 может быть равным 0, 1, ..., $(l - n_1)$, т. е. число различных компонент тензора при данном n_1 равно $(l - n_1 + 1)$. Общее число различных компонент $\tilde{g}(l)$ равно

$$\tilde{g}(l) = \sum_{n_1=0}^l (l - n_1 + 1) = (l + 1)^2 - \sum_{n_1=0}^l n_1 = \frac{(l + 1)(l + 2)}{2}.$$

Чтобы найти число независимых компонент $g(l)$ симметричного тензора $\varepsilon_{ik\dots n}$ с равным нулю следом $\varepsilon_{iip\dots n} = 0$, замечаем, что последнее условие представляет совокупность линейных соотношений между компонентами тензора $\tilde{\varepsilon}_{ik\dots n}$. Число этих дополнительных соотношений равно, очевидно, $\tilde{g}(l - 2)$. Таким образом,

$$g(l) = \tilde{g}(l) - \tilde{g}(l - 2) = 2l + 1,$$

что и требовалось показать.

3.59. Используя запись $|\Psi_{l-1}|^2 = |(\mathbf{e}\mathbf{n})|^2 = \varepsilon_i^* \varepsilon_k n_i n_k$ и учитывая значение интеграла

$$\int n_i n_k d\Omega = 4\pi \delta_{ik}/3,$$

находим из условия нормировки в. ф. $|\mathbf{e}|^2 = \frac{3}{4\pi}$ (следует помнить, что вектор \mathbf{e} , вообще говоря, комплексный).

3.60. Учитывая явный вид шаровых функций Y_{lm} (они приведены, например, при решении задач 3.22 и 3.23), находим значения компонент вектора $\mathbf{e}(m)$, при которых в. ф. $\Psi_{l-1} = (\mathbf{e}(m)\mathbf{n})$ совпадает с соответствующей шаровой функцией:

$$\mathbf{e}(m=0) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}(0, 0, i), \quad \mathbf{e}(m=\pm 1) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}(\mp i, 1, 0).$$

В случае $l=2$ компоненты $\varepsilon_{ik}(m)$ равны

$$\varepsilon_{ik}(m=2) = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ i & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\varepsilon_{ik}(m=1) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & i \\ 1 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\varepsilon_{ik}(m=0) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix},$$

$$\varepsilon_{ik}(m=-1) = -[\varepsilon_{ik}(m=1)]^*,$$

$$\varepsilon_{ik}(m=-2) = [\varepsilon_{ik}(m=2)]^*.$$

3.61. Простое вычисление дает

$$\sum_{m=-1}^1 \varepsilon_i^*(m) \varepsilon_k(m) = \frac{3}{4\pi} \delta_{ik}.$$

3.62. Представим комплексный вектор ε в виде $\varepsilon = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ — вещественные векторы.

а) В случае, если $\mathbf{a}_1 \parallel \mathbf{a}_2$, т. е. $\varepsilon = a\mathbf{n}_0$ (\mathbf{n}_0 — вещественный вектор), проекция момента на ось, направленную вдоль \mathbf{n}_0 , имеет определенное значение, равное нулю. Если же векторы \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 не параллельны, то такой оси, проекция момента на которую имеет определенное значение $\tilde{m} = 0$, не существует.

б) В случае $\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2$ и $a_1 = a_2$ проекция момента на ось, направленную вдоль вектора $[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]$, имеет определенное значение $\tilde{m} = 1$ (и $\tilde{m} = -1$ на противоположное направление).

В общем же случае, когда не выполнено ни одно из этих двух условий, не существует такой оси, проекция момента на которую имеет определенное значение. Это утверждение справедливо для любого значения момента $L \geq 1$ (исключением является случай момента, равного $1/2$, см. 5.12).

3.63. Представив вектор ε (см 3.62) в виде $\varepsilon = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ — вещественные векторы, и учтя результат задачи 3.60, легко сообразить, что вероятность значения проекции момента $\tilde{m} = 0$ на ось, направленную вдоль вектора $[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]$, равна нулю. Если $\mathbf{a}_1 \parallel \mathbf{a}_2$, то вероятность значения проекции момента $\tilde{m} = 0$ на любую ось, перпендикулярную этим векторам, равна нулю.

3.64.

$$\omega(\tilde{m} = 0) = |\langle \varepsilon \mathbf{n}_0 \rangle|^2, \quad \omega(\tilde{m} = \pm 1) = \frac{1}{2} |\langle \varepsilon \mathbf{n}_1 \rangle \mp i \langle \varepsilon [\mathbf{n}_0 \mathbf{n}_1] \rangle|^2. \quad (1)$$

В выражениях (1) вектор ε считается нормированным на единицу, $|\varepsilon|^2 = 1$, \mathbf{n}_1 — вещественный единичный вектор, перпендикулярный \mathbf{n}_0 (выбор вектора \mathbf{n}_1 неоднозначен; однако от конкретного его выбора значения выражений (1) не зависят). Для решения задачи удобно ввести новую систему координат с осью \tilde{z} , направленной вдоль \mathbf{n}_0 , осью \tilde{x} — вдоль \mathbf{n}_1 и осью \tilde{y} — вдоль вектора $[\mathbf{n}_0\mathbf{n}_1]$, и воспользоваться известным видом компонент векторов $\varepsilon(m)$, соответствующих состояниям с определенной проекцией момента на ось z (см. 3.60).

3.65. Положив $\varepsilon = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathbf{a}$, где $|\mathbf{a}| = 1$ из условия нормировки в. ф. на единицу, находим искомые средние:

$$\begin{aligned} \overline{n_i n_k} &= \frac{3}{4\pi} \int a_i^* n_i n_k n_m a_m d\Omega = \\ &= \frac{3}{4\pi} a_i^* a_m \frac{4\pi}{15} (\delta_{ik} \delta_{ml} + \delta_{lm} \delta_{kl} + \delta_{il} \delta_{km}) = \frac{1}{5} (\delta_{ik} + a_i^* a_k + a_k^* a_i). \quad (1) \end{aligned}$$

Если записать комплексный вектор \mathbf{a} в виде $\mathbf{a} = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ — вещественные векторы, то выражение (1) принимает вид

$$\overline{n_i n_k} = \frac{1}{5} [\delta_{ik} + 2(a_{1i} a_{1k} + a_{2i} a_{2k})].$$

3.66. Так как $\hat{l}_i \Psi_{l=1} = -ie_{ikn} x_k \frac{\partial}{\partial x_n} e_m \frac{x_m}{r} = -ie_{ikn} e_n n_k$ и в случае нормированной на единицу в. ф. $\boldsymbol{\varepsilon} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathbf{a}$, где $|\mathbf{a}| = 1$, легко находим

$$\bar{l}_i = -i \frac{3}{4\pi} e_{ikn} a_n a_m^* \int n_m n_k d\Omega = -ie_{ikn} a_k^* a_n,$$

т. е.

$$\bar{\mathbf{l}} = -i[\mathbf{a}^* \mathbf{a}]. \quad (1)$$

Полагая $\mathbf{a} = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$ ($\mathbf{a}_{1,2}$ — вещественные векторы), выражение (1) можно записать в виде

$$\bar{\mathbf{l}} = 2[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2].$$

3.67. Учитывая, что действие оператора $\hat{l}_i = -ie_{inl} x_n \frac{\partial}{\partial x_l}$ на функцию вида $\Psi = (a_n)$ дает

$$\Phi_i \equiv \hat{l}_i \Psi = \hat{l}_i a_k n_k = -ie_{ikn} a_n n_k \equiv b_{i,k} n_k,$$

находим вид оператора \hat{l}_i в векторном представлении:

$$b_{i,k} \equiv \hat{l}_i a_k = -ie_{ikn} a_n,$$

т. е. если в этом представлении записывать в. ф. в виде столбца $\Psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$, то операторами компонент момента являются матрицы \hat{l}_i с элементами $(l_i)_{kn} = -ie_{ikn}$:

$$\hat{l}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Легко убедиться, что коммутационные соотношения для матриц \hat{l}_i компонент момента имеют, как и должно быть, стандартную форму, т. е. $[\hat{l}_i, \hat{l}_k] = ie_{ikn} \hat{l}_n$, а матрица $\hat{\mathbf{l}}^2$ равна $\hat{\mathbf{l}}^2 = 2 \cdot \hat{\mathbf{I}}$ ($\hat{\mathbf{I}}$ — единичная матрица).

В. ф. a_k ($k = 1, 2, 3$) в векторном представлении и в. ф. c_m ($m = 1, 0, -1$) в l_z -представлении связаны унитарным преобразованием $a_k = \sum_m U_{km} c_m$. Вид унитарной матрицы U_{km} читателю предлагается найти самостоятельно.

3.68. а) Наиболее общий вид угловой зависимости в. ф. системы из двух частиц, имеющих моменты $l_1 = l_2 = 1$, следующий:

$$\Psi = a_{ik} n_{1i} n_{2k}, \quad (1)$$

где $\mathbf{n}_1 = \mathbf{r}_1/r_1$, $\mathbf{n}_2 = \mathbf{r}_2/r_2$, a_{ik} — произвольный тензор второго ранга, имеющий девять независимых компонент, что соответствует девяти различным независимым состояниям (в пространстве угловых переменных) системы из двух частиц с $l_1 = l_2 = 1$.

б) Представив тензор a_{ik} в виде

$$a_{ik} = \frac{a_{nn}}{3} \delta_{ik} + \frac{a_{ik} - a_{ki}}{2} + \frac{1}{2} (a_{ik} + a_{ki} - \frac{2}{3} a_{nn} \delta_{ik}), \quad (2)$$

запишем в. ф. (1) следующим образом:

$$\Psi = C(\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) + \mathbf{e}[\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2] + e_{ik} n_{1i} n_{2k}, \quad (3)$$

где

$$C = a_{nn}/3, \quad e_{ik} = \frac{1}{2} [a_{ik} + a_{ki} - 2C \delta_{ik}],$$

$$2e_l = e_{ikl} a_{ik}, \quad a_{ik} - a_{ki} = 2e_{ikl} e_l$$

(e_{ik} — симметричный тензор с равным нулю следом, $e_{ll} = 0$).

Учитывая результат задачи 3.57, нетрудно сообразить, что представление в. ф. в виде (3) является представлением ее в виде трех слагаемых, каждое из которых отвечает определенному значению $L = 0, 1, 2$ суммарного момента системы:

$$\begin{aligned} \Psi_{L=0} &= C(\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2), \quad \Psi_{L=1} = \mathbf{e}[\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2], \\ \Psi_{L=2} &= e_{ik} n_{1i} n_{2k} = \frac{1}{2} e_{ik} [n_{1i} n_{2k} + n_{1k} n_{2i} - \frac{2}{3} (\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) \delta_{ik}]. \end{aligned} \quad (4)$$

Выражение для $\Psi_{L=0}$ согласуется, естественно, с результатом задачи 3.47.

в) Для того чтобы приведенные в. ф. Ψ_L (4) отвечали состоянию с определенным значением M проекции суммарного момента на ось z , компоненты вектора $e_i(M)$ и тензора $e_{ik}(M)$ должны быть выбраны в виде, установленном в 3.60.

В частности, в. ф. $\Psi_{2,2}$ при этом оказывается имеющей вид

$$\Psi_{2,2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin \theta_1 \sin \theta_2 e^{i\varphi_1} e^{i\varphi_2} = \sqrt{\frac{10\pi}{3}} Y_{11}(\theta_1, \varphi_1) Y_{11}(\theta_2, \varphi_2),$$

т. е. действительно является с. ф. (ненормированной) операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z , отвечающей с. з. $L = 2$ и $M = 2$.

Г л а в а 4

ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ

4.1. Оператор Гамильтона, соответствующий функции Гамильтона классического плоского ротатора $H = M_z^2/2I$ ($M_z \equiv p_\varphi$ — проекция момента ротатора на ось, перпендикулярную плоскости вращения), имеет вид $\hat{H} = \frac{\hat{M}_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\varphi^2}$.

Решение стационарного у. Ш.

$$\hat{H}\Psi(\varphi) \equiv -\frac{\hbar^2}{2I}\Psi''(\varphi) = E\Psi(\varphi)$$

с дополнительным условием $\Psi(\varphi + 2\pi) = \Psi(\varphi)$ дает энергетические уровни E_m и нормированные с. ф. $\Psi_m(\varphi)$:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad \Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = \pm |m|, \quad (1)$$

$|m|$ — целое число, $|m| = 0, 1, 2, \dots$. Все уровни энергии плоского ротатора, за исключением основного $m = 0$, двукратно вырождены. С. ф. (1) оператора \hat{H} являются также с. ф. оператора $\hat{L}_z = -i\hbar d/d\varphi$. Составив из них линейные комбинации ($m \neq 0$)

$$\Psi_{|m|}^{(\pm)}(\varphi) = \frac{\Psi_m(\varphi) \pm \Psi_{-m}(\varphi)}{\sqrt{2}} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(m\varphi), \\ \frac{i}{\sqrt{\pi}} \sin(m\varphi), \end{cases}$$

получим с. ф. $\Psi_{|m|}^{(\pm)}$, имеющие определенную четность ± 1 при отражении координат относительно оси x (в плоскости вращения).

4.2. Задачу очень просто решить, если учесть результаты решения задачи 3.15.

Отличные от нуля вероятности различных значений проекции момента m и энергии E_m и их средние значения равны:

$$\omega(m) = \frac{n!}{2^n (2n-1)!!} \left[C_n^{\frac{n-m}{2}} \right]^2, \quad m = n, n-2, \dots, -n,$$

$$\omega(E_m) = \omega(m) + \omega(-m) = 2\omega(m), \quad m = n, n-2, \dots, 2(1),$$

$$\omega(E_0) = \omega(m=0) \neq 0 \quad \text{лишь для четных } n,$$

$$\bar{m} = 0, \quad \bar{E} = \int_0^{2\pi} \Psi^* \hat{H} \Psi d\varphi =$$

$$= \frac{\hbar^2 C_n^2}{2I} \int_0^{2\pi} \cos^{2n-2} \varphi \{n^2 \cos^2 \varphi - n(n-1)\} d\varphi = \frac{n^2 \hbar^2}{2I (2n-1)}.$$

4.3. Функция Гамильтона классического пространственного ротатора равна $H = \mathbf{M}^2/2I$, и, соответственно, оператор Гамильтона имеет вид $\hat{H} = \hbar^2 \hat{I}^2/2I$ (\hat{I}^2 — оператор квадрата момента).

Уровни энергии и нормированные с. ф. гамильтониана равны

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}, \quad \Psi_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$l = 0, 1, \dots; \quad m = l, l-1, \dots, -l,$$

Y_{lm} — шаровые функции. Каждый энергетический уровень ротатора вырожден $(2l + 1)$ -кратно (основной уровень с $l = 0$ — невырожденный). Уровни энергии имеют определенную четность, равную $(-1)^l$.

4.4. а) Проекция момента имеет определенное значение $m = 0$. Записав в. ф. в виде

$$\Psi = C \cos^2 \theta = \frac{\sqrt{4\pi}C}{3} \left[\frac{1}{\sqrt{4\pi}} - \frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{\sqrt{4\pi}} \right]$$

и учитывая явный вид шаровых функций Y_{00} и Y_{20} *), легко найти, что в указанном состоянии момент ротатора может принимать лишь два значения: $l = 0$ и $l = 2$, с вероятностями

$$\omega(l = 0) = 5/9, \quad \omega(l = 2) = 4/9; \quad \bar{E} = \frac{\hbar^2 \bar{I}^2}{2I} = 4\hbar^2/3I.$$

б) Проекция момента имеет определенное значение $m = 2$. Функция распределения по значениям момента l ротатора (и соответственно по его энергии) дается выражением (3) задачи 3.16. Среднее значение энергии ротатора (как и \bar{I}^2) оказывается бесконечным, что означает, что рассматриваемое состояние ротатора не может быть реализовано «экспериментально».

4.5. Так как операторы

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{kx^2}{2}, \quad \hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{ky^2}{2}$$

коммутируют друг с другом и с гамильтонианом плоского осциллятора, равным $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, то с. ф. гамильтониана \hat{H} , образующие полную систему, могут быть также выбраны с. ф. операторов \hat{H}_1 и \hat{H}_2 . Учитывая это обстоятельство и хорошо известный вид с. ф. и уровней энергии обычного линейного осциллятора, находим нормированные в. ф. стационарных состояний и энергетические уровни плоского осциллятора в виде

$$\Psi_{n_1 n_2}(x, y) = \Psi_{n_1}^{\text{осц}}(x) \Psi_{n_2}^{\text{осц}}(y), \quad E_N = \hbar\omega(N + 1), \quad N = 0, 1, \dots$$

$$\omega = \sqrt{k/\mu}, \quad N = n_1 + n_2; \quad n_1 = 0, 1, 2, \dots, \quad n_2 = 0, 1, 2, \dots$$

Энергетическому уровню E_N с данным значением N отвечают линейно независимые с. ф. $\Psi_{n_1 n_2}$ с $n_1 = 0, 1, \dots, N$ (при этом $n_2 = N, N - 1, \dots, 0$), т. е. этот уровень осциллятора $(N + 1)$ -кратно вырожден.

4.6. Используя явный вид в. ф. $\Psi_n^{\text{осц}}(x)$, запишем в. ф. Ψ_{11} в виде

$$\Psi_{11} = \frac{2xy}{\sqrt{\pi} a^3} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}\right) = \frac{2 \cos \varphi \sin \varphi}{\sqrt{\pi} a^3} \rho^2 \exp\left(-\frac{\rho^2}{2a^2}\right) \quad (1)$$

$$*) Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta).$$

(ρ, φ — полярные координаты). С учетом равенства $2 \cos \varphi \sin \varphi = \sin 2\varphi = (e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi})/2i$ из (1) следует, что в состоянии, описываемом в. ф. Ψ_{11} , проекция момента на направление, перпендикулярное плоскости колебаний, может принимать лишь два значения $m = \pm 2$ с одинаковой вероятностью, равной $1/2$.

4.7. Гамильтониан в цилиндрических переменных имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + U(\rho).$$

Операторы \hat{p}_z и \hat{l}_z коммутируют друг с другом и с гамильтонианом; поэтому существует полная система функций, являющихся с. ф. этих операторов и имеющих вид

$$\Psi_{n_\rho m p_z} = \frac{1}{\sqrt{4\pi^2 \hbar}} \exp \left[i \left(\frac{p_z z}{\hbar} + m\varphi \right) \right] \psi_{n_\rho |m|}(\rho), \quad (1)$$

где $\psi_{n_\rho |m|}$ является решением радиального у. Ш. для «поперечного» движения частицы

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{m^2}{\rho^2} \right] \psi_{n_\rho |m|} + U(\rho) \psi_{n_\rho |m|} = \\ = E_{n_\rho |m|} \psi_{n_\rho |m|}, \quad (2) \end{aligned}$$

определяющего также энергетический спектр «поперечного» движения $E_{n_\rho |m|}$; n_ρ — радиальное квантовое число, совпадающее с числом нулей радиальной в. ф. (не считая нулей при $\rho = 0$ и $\rho = \infty$).

Волновой функции (1) отвечает энергия частицы, равная

$$E_{n_\rho |m| p_z} = E_{n_\rho |m|} + p_z^2/2\mu.$$

Каждому энергетическому уровню дискретного спектра «поперечного» движения $E_{n_\rho |m|}$ (или, короче, уровню в двумерном поле $U(\rho)$) отвечает либо одна с. ф. (при $m = 0$), либо две (при $m \neq 0$). Если же имеется случайное вырождение (т. е. энергетические уровни $E_{n_\rho |m|}$ при различных значениях пар чисел n_ρ и $|m|$ совпадают), то кратность вырождения уровней может принимать и другие значения (см., например, 4.5).

Основной уровень в двумерном поле $U(\rho)$ имеет квантовые числа $n_\rho = 0, m = 0$ и является невырожденным. Первый возбужденный уровень может иметь следующие квантовые числа: либо $n_\rho = 0, |m| = 1$, либо $n_\rho = 1, m = 0$ (при случайном вырождении может оказаться, что уровни с указанными квантовыми числами совпадают). Никаких других квантовых чисел первое возбужденное состояние иметь не может. Таким образом, кратность вырождения $g = 3$ первого возбужденного уровня в принципе возможна, а значения $g = 4$ быть не может.

4.8. Учитывая коммутативность операторов H и l_z , с. ф. гамильтониана можно представить в виде $\Psi_{n_\rho m}(\rho, \varphi) = \Psi_{n_\rho |m|}(\rho) e^{im\varphi}$; при этом

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \kappa_{n_\rho |m|}^2 - \frac{m^2}{\rho^2} \right] \Psi_{n_\rho |m|}(\rho) = 0, \quad \rho < a, \quad (1)$$

$$\Psi_{n_\rho |m|}(\rho = a) = 0, \quad \kappa_{n_\rho |m|} = \sqrt{2\mu E_{n_\rho |m|} / \hbar^2}, \quad (2)$$

n_ρ — радиальное квантовое число, равное числу нулей функции $\Psi_{n_\rho |m|}(\rho)$, не считая нулей при $\rho = a$ и $\rho = 0$ (в случае $m \neq 0$).

Решение уравнения (1), имеющее необходимое поведение при $\rho \rightarrow 0$ (фактически не возрастающее при $\rho \rightarrow 0$), представляется в виде

$$\Psi_{n_\rho |m|}(\rho) = C J_m(\kappa_{n_\rho |m|} \rho), \quad (3)$$

где J_m — функция Бесселя. Граничное условие (2) определяет энергетический спектр частицы:

$$E_{n_\rho |m|} = \hbar^2 \alpha_{n_\rho+1, m}^2 / 2\mu a^2, \quad (4)$$

где $\alpha_{km} > 0$ — k -й корень функции Бесселя $J_m(\alpha_{km}) = 0$ (в порядке возрастания α_{km}); в частности, $\alpha_{10} \approx 2,40$, $\alpha_{11} \approx 3,83$ и соответственно $E_{00} \approx 2,88 \frac{\hbar^2}{\mu a^2}$, $E_{01} \approx 7,33 \frac{\hbar^2}{\mu a^2}$.

4.9. Не конкретизируя пока значения m , представим с. ф. гамильтониана в виде $\Psi_{n_\rho m} = \chi_{n_\rho |m|}(\rho) e^{im\varphi}$, где $\chi_{n_\rho |m|}$ удовлетворяет уравнению ($E_{n_\rho |m|} < 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right] \chi_{n_\rho |m|} + U(\rho) \chi_{n_\rho |m|} = E_{n_\rho |m|} \chi_{n_\rho |m|}. \quad (1)$$

Учитывая конкретный вид потенциала и граничные условия для $\chi_{n_\rho |m|}$ при $\rho \rightarrow 0$ и $\rho \rightarrow \infty$, находим решение уравнения (1):

$$\chi_{n_\rho |m|}(\rho) = \begin{cases} C_1 J_{|m|}(\sqrt{2\mu(U_0 - |E_{n_\rho |m|})} / \hbar^2 \rho), & \rho < a, \\ C_2 K_{|m|}(\sqrt{2\mu|E_{n_\rho |m|}|} / \hbar^2 \rho), & \rho > a, \end{cases} \quad (2)$$

где $K_{|m|}$ — функция Макдональда.

Условия непрерывности в. ф. (2) и ее производной в точке $\rho = a$ приводят к соотношению

$$\begin{aligned} & \sqrt{|E_{n_\rho |m|}|} J_{|m|}(\sqrt{2\mu(U_0 - |E_{n_\rho |m|})} a^2 / \hbar^2) \times \\ & \quad \times K'_{|m|}(\sqrt{2\mu|E_{n_\rho |m|}|} a^2 / \hbar^2) = \sqrt{U_0 - |E_{n_\rho |m|}|} \times \\ & \quad \times J'_{|m|}(\sqrt{2\mu(U_0 - |E_{n_\rho |m|})} a^2 / \hbar^2) K_{|m|}(\sqrt{2\mu|E_{n_\rho |m|}|} a^2 / \hbar^2), \end{aligned} \quad (3)$$

определяющему энергетические уровни д. с. ($-U_0 < E_{n_\rho |m|} < 0$).

В случае мелкой ямы $\xi = \mu a^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$ аргументы цилиндрических функций в соотношении (3) малы. При $m = 0$ с учетом формул

$J_0(x) \approx 1$, $J'_0(x) \approx -x/2$, $K_0(x) \approx \ln(2/x)$, $K'_0(x) \approx -1/x$, справедливых при $x \ll 1$, соотношение (3) принимает вид

$$\mu(U_0 - |E_{n_p 0}|) a^2 \hbar^{-2} \ln \sqrt{2\hbar^2 / \mu a^2 |E_{n_p 0}|} \approx 1. \quad (4)$$

Последнее уравнение имеет только один корень E_{00} :

$$E_{00} \approx -\frac{2\hbar^2}{\mu a^2} \exp\left(-\frac{2\hbar^2}{\mu a^2 U_0}\right) \equiv -2U_0 \xi^{-1} \exp(-2/\xi), \quad (5)$$

который легко найти, если заметить, что из (4) следует $|E_{n_p 0}| \ll U_0$, и пренебречь $|E_{n_p 0}|$ в сомножителе перед логарифмом.

Для $m \neq 0$, как это следует из соотношения (3), состояния д.с. в мелкой яме отсутствуют (см. следующую задачу). Таким образом, в мелкой двумерной яме, как и в одномерном случае (см. 2.8), имеется лишь одно состояние д.с. Энергия этого состояния мала по сравнению с глубиной ямы:

$$|E_{00}|/U_0 \approx (2/\xi) \exp(-2/\xi) \ll 1$$

(сравнить с соответствующим значением $|E_0|/U_0 \sim \xi \ll 1$ в одномерном случае).

4.10. Энергетические уровни д.с. определяются из решения трансцендентного уравнения (3), полученного в предыдущей задаче.

В случае мелкой ямы $\xi = \mu a^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$, учитывая известный вид функций $K_m(z)$ и $K'_m(z)$ при $z \rightarrow 0$ ($m \neq 0$), легко убедиться, что указанное уравнение не имеет корней (правая и левая части уравнения имеют разные знаки), т. е. состояния д.с. с $m \neq 0$ отсутствуют. Такие состояния появляются лишь при достаточном углублении ямы. Чтобы найти значения параметров ямы, при которых это происходит, следует учесть, что в условиях, когда уровень только появился, он имеет малую энергию. Рассматривая именно такой случай, запишем уравнение (3) предыдущей задачи в виде

$$\frac{x J'_{|m|}(x)}{J_{|m|}(x)} \approx -|m|, \quad x \equiv \sqrt{\frac{2\mu(U_0 - |E_{0|m|}) a^2}{\hbar^2}} \quad (1)$$

(мы учли, что при $z \rightarrow 0$ $K_m(z) \approx \frac{1}{2} (|m| - 1)! \left(\frac{z}{2}\right)^{-|m|}$).

На основании (1) можно сообразить, что условие

$$\sqrt{2\xi} J_{|m|}(\sqrt{2\xi}) + |m| J_{|m|}(\sqrt{2\xi}) = 0 \quad (2)$$

определяет параметры ямы, при которых в ней появляются по мере ее углубления состояния д. с. с проекцией момента $m \neq 0$.

Условие (2) эквивалентно следующему:

$$J_{|m|-1}(\sqrt{2\xi}) = 0. \quad (3)$$

В частности, учитывая значение $x_1 \approx 2,40$ первого корня функции Бесселя $J_0(x)$, находим согласно (3) условие существования в рассматриваемой яме состояний д. с. с $|m| = 1$:

$$U_0 \geq 2,88 \frac{\hbar^2}{\mu a^2} \quad (\sqrt{2\xi} \geq x_1).$$

Отметим, что полученные условия (2) и (3) не только определяют параметры ямы, при которых в ней появляется первый уровень д. с. с $m \neq 0$ (первый, наименьший корень уравнения (3)), но и вообще являются условиями появления новых состояний д. с. с $m \neq 0$ по мере углубления ямы.

4.11. Задача решается аналогично 4.9.

Функция $\chi_{n_\rho |m|}(\rho)$ имеет вид

$$\chi_{n_\rho |m|}(\rho) = \begin{cases} C_1 I_m(\kappa_{n_\rho m} \rho) & (\kappa_{n_\rho m} = \sqrt{2\mu |E_{n_\rho |m|}|/\hbar^2}), \quad \rho < a, \\ C_2 K_m(\kappa_{n_\rho m} \rho), & \rho > a. \end{cases} \quad (1)$$

Условия сшивания функции (1) в точке $\rho = a$, совершенно аналогичные условиям сшивания в. ф. для δ -функционального потенциала в одномерном случае (см. 2.10), приводят к соотношению

$$x [K'_m(x) I_m(x) - K_m(x) I'_m(x)] = -\frac{2\mu a a}{\hbar^2} K_m(x) I_m(x) \quad (x \equiv \kappa_{n_\rho m} a), \quad (2)$$

определяющему энергетический спектр частицы. Учитывая значение вронскиана $I_m(x) K'_m(x) - I'_m(x) K_m(x) = -1/x$, запишем (2) в виде

$$K_m(\kappa_{n_\rho m} a) I_m(\kappa_{n_\rho m} a) = \hbar^2 / 2\mu a a. \quad (3)$$

Можно заметить, что левая часть уравнения (3) $F_m(z) \equiv K_m(z) I_m(z)$, $z = \kappa_{n_\rho m} a \geq 0$, является монотонно убывающей функцией z , причем $F_m(z) \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \infty$ (так как при этом $I_m(z) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} e^z$, $K_m(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}$). Докажем монотонность $F_m(z)$. Предположим противное, т. е. что $F_m(z)$ — не монотонная функция. Тогда график этой функции при достаточно больших значениях z будет иметь вид, указанный на рис. 25, и при значении правой части (3), равном f_0 , уравнение (3) будет

иметь по крайней мере два корня: z_1 и z_2 . Это означает, что в рассматриваемом поле имеется два уровня с одним и тем же значением m , при этом радиальная зависимость соответствующих в. ф. определяется формулой (1). Но таких двух уровней быть не может, так как соответствующие им с. ф. гамильтониана не были бы ортогональными друг другу (действительно, в. ф. вида (1) при любом $\kappa_{n\rho m}$ является знакоопределенной — функции $I_m(z)$ и $K_m(z)$ не имеют нулей — и две такие функции при различных $\kappa_{n\rho m}$ не могут быть ортогональными). Таким образом, $F_m(z)$ — монотонно убывающая функция z ($z \geq 0$).

Так как для $m = 0$ при $z \rightarrow 0$

$$I_0(z) \approx 1 + \frac{z^2}{4}, \quad K_0(z) \approx \ln \frac{2}{z}, \quad (4)$$

то в этом случае $F_0(z) \rightarrow \infty$. Графики функций в правой и левой частях уравнения (3) изображены на рис. 26, из которого видно, что при $m = 0$ имеется один (и только один) уровень д. с.

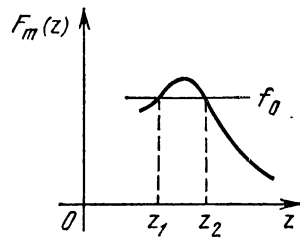


Рис. 25.

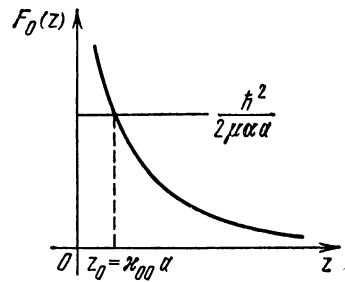


Рис. 26.

Для мелкой ямы $\xi = \mu\alpha a / \hbar^2 \ll 1$ (при этом правая часть (3) велика) находим согласно (3) и (4)

$$\ln \frac{2}{\kappa_{00}a} \approx \frac{1}{2\xi},$$

т. е.

$$E_{00} \approx -\frac{2\hbar^2}{\mu a^2} e^{-1/\xi} \quad \left(|E_{00}| \ll \frac{\hbar^2}{\mu a^2} \right).$$

В случае глубокой ямы $\xi \gg 1$, используя приведенные выше асимптотики цилиндрических функций, находим

$$E_{00} \approx -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}.$$

4.12. Задача решается аналогично предыдущей. Различие проявляется лишь в том, что в случае $m \neq 0$ максимальное значение функции $F_m(z) = I_m(z)K_m(z)$ равно $I_m(0)K_m(0) = 1/2|m|$.

(рис. 27), и поэтому уравнение (3) предыдущей задачи имеет один (и только один) корень при выполнении условия

$$\mu\alpha/\hbar^2 > |m|.$$

В противном случае состояния д. с. с данным $m \neq 0$ отсутствуют.

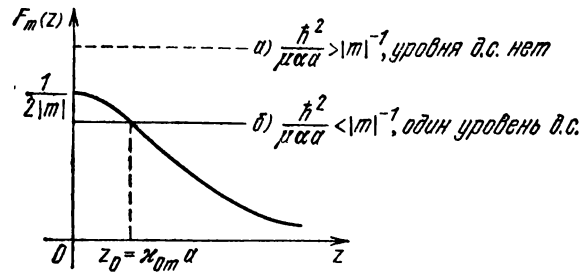


Рис. 27.

4.13. У. Ш. для радиальной части с. ф. гамильтониана $\Psi_{n_\rho m} = \chi_{n_\rho |m|}(\rho) e^{im\varphi}$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right] \chi_{n_\rho |m|} - \frac{\alpha}{\rho} \chi_{n_\rho |m|} = E_{n_\rho |m|} \chi_{n_\rho |m|}$$

заменой функции $\chi_{n_\rho |m|} = u_{n_\rho m} / \sqrt{\rho}$ приводится к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{m^2 - 1/4}{\rho^2} \right] u_{n_\rho m} - \frac{\alpha}{\rho} u_{n_\rho m} = E_{n_\rho |m|} u_{n_\rho m}. \quad (1)$$

Это уравнение и граничные условия $u_{n_\rho m}(0) = 0$, $u_{n_\rho m}(\infty) = 0$ совершенно аналогичны тем, которые возникают при нахождении радиальной в. ф. $u_{n_r l}$ и уровней энергии частицы в кулоновском поле $U(r) = -\alpha/r$, если записать с. ф. гамильтониана в виде $\Psi_{n_r l m} = Y_{lm} u_{n_r l}(r)/r$. Различие состоит только в замене множителя $l(l+1)$ (в центробежной энергии) на величину $m^2 - 1/4$. Учитывая хорошо известное выражение

$$E_{n_r l} = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2 (n_r + l + 1)^2} \quad (2)$$

для энергетических уровней частицы в кулоновском поле и заменяя, согласно сказанному выше, величину $l + 1/2$ на $|m|$, находим энергетический спектр частицы в двумерном поле $U(\rho) = -\alpha/\rho$:

$$E_{n_\rho |m|} = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2 (n_\rho + |m| + 1/2)^2}. \quad (3)$$

Из выражения (3) видно, что в рассматриваемом поле, как и в кулоновском, имеет место случайное вырождение, так

как энергия зависит только от комбинации $n_\rho + |m|$ квантовых чисел n_ρ и m . Если ввести квантовое число $N = n_\rho + |m| + 1$ (являющееся аналогом главного квантового числа $n = n_r + l + 1$ в кулоновском поле), то выражение (3) можно записать в виде

$$E_N = -\frac{\mu a^2}{2\hbar^2(N-1/2)^2}, \quad N = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Энергетический уровень E_N имеет, очевидно, следующую кратность вырождения:

$$g(N) = 1 + \sum_{l=1}^{N-1} 2 = 2N - 1.$$

4.14. Так как приведенные функции имеют много общего с в. ф. основного состояния — отвечают значению $m = 0$ и не имеют нулей на интервале $0 < \rho < a$, — то следует ожидать, что среднее значение энергии частицы в указанных состояниях будет достаточно близким к энергии основного состояния, являясь для нее верхним пределом.

а) В. ф. нормирована на единицу при $|A|^2 = 6/\pi a^4$. Имеем

$$\begin{aligned} \bar{T} = \overline{p^2/2\mu} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \int \Psi^*(\rho) \left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} \Psi(\rho) \right] 2\pi\rho d\rho = \\ &= \frac{\pi\hbar^2}{\mu} \int \rho \left| \frac{d}{d\rho} \Psi(\rho) \right|^2 d\rho = \frac{3\hbar^2}{\mu a^2}. \end{aligned}$$

Так как в. ф. при $\rho \geq a$ равна тождественно нулю, а бесконечно глубокую яму можно рассматривать как предел ямы конечной глубины, то $\overline{U(\rho)} = 0$. Таким образом, находим

$$E_0 \equiv E_{n_\rho=0, m=0} \approx \bar{E} = \frac{3\hbar^2}{\mu a^2}. \quad (1)$$

б) $|B|^{-2} = (\pi^2 - 4)a^2/2\pi$ — из нормировки в. ф. В результате получаем:

$$\overline{U(\rho)} = 0, \quad \bar{T} = \frac{\pi^2(\pi^2 + 4)}{8(\pi^2 - 4)} \frac{\hbar^2}{\mu a^2}, \quad E_0 \approx \bar{E} = \bar{T} \approx 2,92 \frac{\hbar^2}{\mu a^2}. \quad (2)$$

Приближенные значения (1) и (2) для энергии E_0 основного состояния частицы следует сравнить с точным значением $E_0 = 2,88 \frac{\hbar^2}{\mu a^2}$ согласно 4.8.

4.15. По условию задачи в. ф. состояния частицы с квантовыми числами $n_\rho = 0$, $m = \pm 1$ предлагается аппроксимировать функцией вида

$$\Psi_{0, \pm 1} = C\rho(a - \rho) \exp(\pm i\varphi). \quad (1)$$

Эта функция имеет много общего с точной в. ф.: правильное поведение при $\rho \rightarrow 0$, отсутствие нулей у радиальной части на

интервале $0 < \rho < a$, выполнение граничного условия при $\rho = a$. Поэтому можно ожидать, что среднее значение энергии частицы в указанном состоянии будет близким к точному значению E_{01} энергии первого возбужденного состояния с $|m|=1$, в соответствии с идеями вариационного метода (следует напомнить, что в. ф. состояний с $|m|=1$ ортогональны в. ф., отвечающим $m=0$).

Нормировка в. ф. (1) на единицу дает $|C|^2 = 30/\pi a^6$. Далее,

$$\begin{aligned} \bar{T} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \iint \Psi^* \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Psi \rho \, d\rho \, d\varphi = \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \iint \left[\left| \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right|^2 + \frac{1}{\rho^2} |\Psi|^2 \right] \rho \, d\rho \, d\varphi = \frac{15}{2} \frac{\hbar^2}{\mu a^2}. \end{aligned}$$

Так как $\overline{U(\rho)} = 0$, то в качестве приближенного значения энергии E_{01} (в рамках простейшего варианта вариационного метода) получаем

$$E_{01} \approx \bar{E} = \bar{T} = 7,50 \frac{\hbar^2}{\mu a^2},$$

что следует сравнить с точным значением $E_{01} = 7,33 \frac{\hbar^2}{\mu a^2}$ согласно 4.8.

4.16. Указанная в условии задачи функция нормирована на единицу при $|C|^2 = 2\alpha^2/\pi$. Простые вычисления дают

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int \left| \frac{d}{d\rho} \Psi(\rho) \right|^2 2\pi\rho \, d\rho = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu}, \\ \overline{U(\rho)} &= \frac{\hbar \rho^2}{2} = \frac{3}{4} \frac{\hbar k}{\alpha^2}, \quad \bar{E}(\alpha) = \bar{T} + \bar{U} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} + \frac{3}{4} \frac{\hbar k}{\alpha^2}. \end{aligned}$$

Минимизируя величину $\bar{E}(\alpha)$ по α , находим в соответствии с основной идеей вариационного метода приближенное значение для энергии основного состояния:

$$E_0 \approx \min \bar{E}(\alpha) = \sqrt{3/2} \hbar \omega = 1,22 \hbar \omega.$$

Точное значение $E_0 = \hbar \omega$.

4.17. Функция Грина удовлетворяет уравнению ($\kappa = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2} > 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} (\Delta - \kappa^2) G_E(\rho, \rho') = \delta(\rho - \rho'). \quad (1)$$

Вводя переменную $\tilde{\rho} = \rho - \rho'$ и учитывая, что $\Delta_{\tilde{\rho}} = \Delta_{\rho}$ (так как $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$), запишем уравнение (1) в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} (\Delta_{\tilde{\rho}} - \kappa^2) G_E = \delta(\tilde{\rho}). \quad (2)$$

Из (2) следует, что функция Грина в переменных $\tilde{\rho}, \rho'$ не зависит от ρ' и, как легко сообразить, имея в виду аксиальную

симметрию уравнения (2), является функцией только величины $\tilde{\rho} = |\rho - \rho'|$. Решение уравнения (2) при $\rho \neq 0$ имеет вид

$$G_E(\tilde{\rho}) = C_1 I_0(\kappa \tilde{\rho}) + C_2 K_0(\kappa \tilde{\rho}).$$

Условие убывания функции Грина при $\rho \rightarrow \infty$ дает $C_1 = 0$. Для определения C_2 проинтегрируем обе части уравнения (2) по кругу малого радиуса ε с центром в точке $\tilde{\rho} = 0$. При этом в правой части получаем единицу. Интегрирование второго слагаемого в левой части уравнения дает нуль при $\varepsilon \rightarrow 0$. Интеграл же от первого слагаемого преобразуем с помощью теоремы Остроградского — Гаусса:

$$\int \Delta G dV = \oint \nabla G dS.$$

В двумерном случае $dV \equiv dS$, $dS \equiv dl \equiv \mathbf{n} dl$ (*). Так как при $x \rightarrow 0$ $K_0(x) \approx \ln 2/x$, то $\nabla K_0(\kappa \rho) \approx -\rho/\rho^2$ при $\rho \rightarrow 0$, и в результате интегрирования получаем $\frac{\pi \hbar^2}{\mu} C_2 = 1$, так что окончательное выражение для функции Грина имеет вид

$$G_E(\rho, \rho') = \mu K_0(\kappa |\rho - \rho'|) / \pi \hbar^2.$$

Зависимость функции Грина только от $|\rho - \rho'|$ является отражением однородности и изотропности пространства (в данном случае — плоскости) для свободных частиц.

4.18. Рассмотрение, совершенно аналогичное проведенному в предыдущей задаче, приводит к следующему виду функций Грина:

$$G_E^{(\pm)}(\rho, \rho') = \pm i \frac{\mu}{2\hbar^2} H_0^{(1,2)}(\kappa |\rho - \rho'|), \quad \kappa = \sqrt{2\mu E/\hbar^2} > 0,$$

где $H_0^{(1,2)}(x)$ — функции Ганкеля.

4.19. Функция Грина удовлетворяет уравнению ($\kappa = \sqrt{2IE/\hbar^2}$)

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \left(\frac{d^2}{d\varphi^2} + \kappa^2 \right) G_E(\varphi, \varphi') = \delta(\varphi - \varphi'). \quad (1)$$

Из соображений симметрии очевидно, что G_E является функцией вида $G_E = G_E(|\varphi - \varphi'|)$, и из уравнения (1) при $\varphi \neq \varphi'$ следует

$$G_E = C \cos[\kappa |\varphi - \varphi'| + \alpha].$$

Значение $C = \frac{I}{\kappa \hbar^2 \sin \alpha}$ вытекает из условия сшивания функции G_E в точке $\varphi = \varphi'$ (сравнить с решением задачи 2.36), а

*) Обращаем внимание на то, что орт \mathbf{n} — орт «внешней нормали» — перпендикулярен контуру интегрирования! В данной задаче

$$d\mathbf{l} = \mathbf{n} dl = \frac{\rho}{\rho} \rho d\varphi = \rho d\varphi \quad (\rho = \varepsilon).$$

величина α находится из условия равенства функции Грина и ее производной в точках $\varphi - \varphi' = \pm\pi$, соответствующих одной и той же точке пространства*), и равна $\alpha = -\kappa\pi$.

Таким образом, функция Грина имеет вид

$$G_E = - \frac{I \cos [\kappa |\varphi - \varphi'| - \kappa\pi]}{\kappa \hbar^2 \sin \kappa\pi}.$$

Функция Грина G_E имеет полюсы в точках $\kappa = \pm m$ (m — целые числа, $m = 0, 1, 2, \dots$), т. е. в точках $E_m = \hbar^2 m^2 / 2I$ плоскости переменной E , так что положения полюсов совпадают со значениями энергетических уровней ротатора.

4.20. Если с. ф. гамильтониана частицы в центральном поле представить в виде $\Psi_{n_r l m} = R_{n_r l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) / r$, то энергетические уровни $E_{n_r l}$ и радиальная часть $R_{n_r l}$ в. ф. определяются из решения уравнения

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[- \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} U(r) \right] R_{n_r l} = E_{n_r l} R_{n_r l} \quad (1)$$

с граничными условиями $R_{n_r l}(0) = 0$ и $R_{n_r l}(\infty) = 0$.

а) Уравнение (1) имеет вид, совершенно аналогичный одномерному у. Ш. в поле

$$\tilde{U}(x) = \begin{cases} U(x) + \hbar^2 l(l+1) / 2\mu x^2, & x > 0, \\ \infty, & x < 0, \end{cases}$$

и согласно так называемой осцилляционной теореме, гласящей, что в одномерном случае с. ф. гамильтониана, отвечающая N -му уровню (в порядке возрастания энергии), имеет $N - 1$ нулей (не считая нулей при $x \rightarrow +\infty$; если движение частицы ограничено непроницаемой стенкой, так что в. ф. равна нулю «на стенке», то такой «нуль» также не учитывается), можно утверждать, что $E_{n_r l}$ при фиксированном l с ростом n_r возрастает, причем самому нижнему уровню (при данном l) отвечает значение $n_r = 0$.

б) Рассматривая формально $E_{n_r l}$ при данном n_r как функцию параметра l , изменяющегося непрерывно (так что непосредственный физический смысл — значения энергетического уровня — эта функция имеет лишь в точках, отвечающих значениям $l = 0, 1, 2, \dots$), на основании результата задачи 1.28, примененного к уравнению (1), имеем

$$\partial E_{n_r l} / \partial l = \overline{\partial \hat{H} / \partial l} = \overline{\hbar^2 (2l + 1) / 2\mu r^2} > 0,$$

*) Эти условия, как нетрудно сообразить, эквивалентны равенству

$$G_E(\varphi, \varphi') = G_E(\varphi + 2\pi, \varphi').$$

что и доказывает возрастание величины $E_{n_r l}$ с ростом l (при фиксированном значении n_r).

4.21. а) Двукратно вырожденных уровней быть не может (подчеркнем, что речь идет о бесспиновых частицах).

б) Так как квантовые числа основного уровня $n_r = 0, l = 0$, то у первого возбужденного уровня, согласно предыдущей задаче, могут быть только следующие квантовые числа: либо $n_r = 1, l = 0$ (при этом уровень является невырожденным), либо $n_r = 0, l = 1$ (уровень трехкратно вырожден). Конкретное значение квантовых чисел первого возбужденного состояния зависит от вида поля $U(r)$. Наконец, при наличии случайного вырождения может оказаться, что величины $E_{n_r l}$ при указанных выше значениях n_r и l совпадают. В этом случае будет иметь место 4-кратное вырождение уровня. Никаких других значений (кроме полученных выше 1, 3, 4) кратность вырождения первого возбужденного уровня принимать не может.

в) Энергетическому уровню частицы в центральном поле с кратностью вырождения $g = 7$ соответствуют состояния частицы с определенным значением момента $l = 3$.

Если $g = 9$, то могут быть две возможности: либо данному уровню отвечают состояния частицы с определенным значением $l = 4$ момента и уровень является четным, либо — при случайном вырождении — этому уровню соответствуют значения момента частицы, равные $l = 0, 1, 2$ (и уровень не имеет определенной четности). Последний случай реализуется, например, в кулоновском поле.

4.22. а) Учитывая результат задачи 4.20 о характере изменения $E_{n_r l}$ с ростом l , легко сообразить, что, независимо от конкретного вида поля $U(r)$, в N -м состоянии д.с. значение момента частицы не может превышать $l_{\max} = N - 1$ (причем если $l = l_{\max}$, то $n_r = 0$).

б) Максимально возможное значение кратности вырождения уровня получается в том случае, если этому уровню соответствуют состояния частицы со значениями момента от $l = 0$ до $l = l_{\max} = N - 1$, и равно

$$g_{\max}(N) = \sum_{l=0}^{N-1} (2l + 1) = N^2 \quad (1)$$

(отметим, что уровни с одинаковыми значением n_r (или l) и различными l (n_r), очевидно, вырожденными быть не могут).

Полученное значение (1) для $g_{\max}(N)$ реализуется в кулоновском поле притяжения.

Отметим, что если для некоторого N величина $g(N)$ принимает максимально возможное значение, то для $\tilde{N} \leq N$ величина $g(\tilde{N})$ также принимает максимально возможное значение (1) с $N = \tilde{N}$. При этом для данных значений \tilde{N} и l однозначно определяется квантовое число $n_r = \tilde{N} - l - 1$.

4.23. Используя соображения, высказанные при решении задачи 4.5 о плоском осцилляторе, легко находим решение в виде

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \Psi_{n_1}^{\text{осц}}(x) \Psi_{n_2}^{\text{осц}}(y) \Psi_{n_3}^{\text{осц}}(z);$$

$$n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots, \quad (1)$$

$$E_N = \hbar\omega(N + 3/2), \quad N = n_1 + n_2 + n_3, \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

Кратность вырождения N -го уровня (основному состоянию отвечает значение $N = 0$) равна

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

4.24. Поле $U = kr^2/2$ является центральным, поэтому энергетические уровни и с. ф. гамильтониана можно классифицировать с помощью квантовых чисел n_r, l, m (см. также следующую задачу). Основному состоянию отвечают квантовые числа $n_r = 0, l = 0$ (действительно, в. ф. Ψ_{000} предыдущей задачи не имеет нулей и является сферически симметричной, т. е. отвечает $l = 0$),

Возможные значения квантовых чисел первого возбужденного уровня следующие (в скобках указано значение кратности вырождения уровня при соответствующих квантовых числах):

$$n_r = 1, \quad l = 0 \quad (g = 1); \quad n_r = 0, \quad l = 1 \quad (g = 3).$$

Так как согласно предыдущей задаче для осциллятора при $N = 1$ (первый возбужденный уровень) кратность вырождения равна $G = 3$, то немедленно заключаем, что этому уровню отвечает значение момента $l = 1$ (квантовые числа уровня $n_r = 0, l = 1$).

При квантовых числах $n_r = 0, l = 0$ основного и $n_r = 0, l = 1$ первого возбужденного состояний возможны только следующие квантовые числа у второго возбужденного уровня:

$$n_r = 1, \quad l = 0 \quad (g = 1); \quad n_r = 0, \quad l = 2 \quad (g = 5) \quad (1)$$

(см. 4.20). Так как у осциллятора $G = 6$ при $N = 2$, то согласно (1) такое значение G можно получить единственным способом — в случае равенства энергий $E_{n_r=1, l=0} = E_{0,2}$, соответствующего «случайному» вырождению уровней.

Учитывая установленные выше квантовые числа осциллятора при $N = 0, 1, 2$, находим возможные значения n_r, l при $N = 3$:

$$n_r = 0, \quad l = 3 \quad (g = 7); \quad n_r = 1, \quad l = 1 \quad (g = 3); \quad n_r = 2, \quad l = 0 \quad (g = 1). \quad (2)$$

Так как $G(N = 3) = 10$, то согласно (2) уровню осциллятора с $N = 3$ отвечают квантовые числа $n_r = 0, l = 3$ и $n_r = 1, l = 1$.

Классификацию произвольного энергетического уровня осциллятора по значениям квантовых чисел n_r, l см. в следующей задаче.

Учитывая явный вид в. ф.

$$\Psi_n^{\text{осц}}(x) = (2^n n! x_0 \sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-x^2/2x_0^2} H_n(x/x_0)$$

и выражения для полиномов Эрмита $H_0 = 1, H_2 = 4x^2 - 2$, легко найти для $N = 2$ искомую функцию $\Psi_{l=0}$ (являющуюся сферически симметричной):

$$\Psi_{l=0} = \frac{1}{\sqrt{3}} \{\Psi_{200} + \Psi_{020} + \Psi_{002}\} = \frac{4r^2/x_0^2 - 6}{\sqrt{3} (2x_0 \sqrt{\pi})^{3/2}} e^{-r^2/2x_0^2}.$$

4.25. Представив с. ф. гамильтониана в виде $\Psi_{n_r l m} = R_{n_r l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, имеем уравнение

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{kr^2}{2} \right] \right\} R_{n_r l}(r) = 0. \quad (1)$$

Вводя новую переменную $x = \sqrt{k\mu} r^2/\hbar$, преобразуем (1) к виду

$$\left\{ x \frac{d^2}{dx^2} + \frac{3}{2} \frac{d}{dx} + \left[\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{l(l+1)}{4x} - \frac{x}{4} \right] \right\} R_{n_r l} = 0. \quad (2)$$

Решение уравнения (2) ищем в виде

$$R_{n_r l} = e^{-x/2} x^{l/2} \omega. \quad (3)$$

Для функции ω из (2) и (3) следует уравнение

$$x \frac{d^2 \omega}{dx^2} + \left(l + \frac{3}{2} - x \right) \frac{d\omega}{dx} + \left(\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{l}{2} - \frac{3}{4} \right) \omega = 0. \quad (4)$$

Так как при $r \rightarrow 0$ (при этом $x \rightarrow 0$) в. ф. $R_{n_r l}$ должна иметь вид $R \propto r^l \propto x^{l/2}$, то $\omega \rightarrow \text{const}$ при $x \rightarrow 0$ и решение уравнения (4) следует выбрать в виде

$$\omega(x) = CF(-E/2\hbar\omega + l/2 + 3/4, l + 3/2, x), \quad (5)$$

где $F(\alpha, \beta, x)$ — вырожденная гипергеометрическая функция.

Для того чтобы радиальная в. ф. (3) убывала при $r \rightarrow \infty$, необходимо, чтобы гипергеометрическая функция (5) свелась к полиному (иначе $F \propto e^x$ при $x \rightarrow +\infty$ и $R \propto e^{x/2}$ расходится при $x, r \rightarrow \infty$).

Функция (5) сводится к полиному при выполнении условия

$$-E/2\hbar\omega + l/2 + 3/4 = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (6)$$

определяющего энергетический спектр частицы

$$E_{n_r l} = \hbar\omega(l + 2n_r + 3/2) \equiv \hbar\omega(N + 3/2), \quad N = 2n_r + l = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

В. ф., отвечающие энергетическому уровню (7), имеют вид

$$\Psi_{n_r, l, m} = Cr^l \exp(-\mu\omega r^2/2\hbar) F(-n_r, l + 3/2, \mu\omega r^2/\hbar) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Очевидно, что данному значению N соответствуют состояния частицы с моментом l , равным $l = N, N - 2, \dots$. Кратность вырождения уровня равна

$$g(N) = \sum_{l=N, N-2, \dots} (2l + 1) = \frac{(N + 1)(N + 2)}{2}$$

в согласии с результатом задачи 4.23.

Так как возможные значения момента частицы в состояниях, отвечающих данному значению N , отличаются друг от друга на величину, кратную 2, то энергетические уровни осциллятора имеют определенную четность, равную $(-1)^N$.

4.26. Простое вычисление (при этом удобно использовать соотношения задачи 1.9) дает $[\hat{H}, \hat{T}_{ik}] = 0$. В то же время операторы \hat{T}_{ik} не коммутируют с оператором \hat{I}^2 . Так,

$$[\hat{I}^2, \hat{T}_{11}] = \left(\frac{4l}{\hbar} \hat{x} \hat{p}_x + 2\right) (\hat{p}^2/\mu - k\hat{r}^2) - \\ - \left(\frac{4i}{\hbar} \hat{r} \hat{p} + 6\right) (\hat{p}_x^2/\mu - k\hat{x}^2) \neq 0.$$

Из коммутативности операторов \hat{I}^2 и \hat{T}_{ik} с гамильтонианом и их взаимной некоммутативности следует, на основании результата задачи 1.29, наличие в спектре гамильтониана «случайного» вырождения. Как известно (см. предыдущую задачу), случайное вырождение уровней осциллятора обладает тем свойством, что вырождены уровни $E_{n_r, l}$ с различными значениями l одинаковой четности (либо l четные, либо нечетные). Это обстоятельство является следствием того факта, что операторы \hat{T}_{ik} , не коммутирующие с \hat{I}^2 , коммутируют с оператором отражения \hat{I} , так что уровни осциллятора имеют определенную четность (сравнить со случайным вырождением в кулоновском поле, обсуждаемым в следующей задаче).

4.27. Естественно в соответствие \hat{A} поставить эрмитов векторный оператор

$$\hat{A} = \frac{\hbar}{2\mu} \{ [\hat{p}, \hat{I}] - [\hat{I}, \hat{p}] \} - \frac{\alpha r}{r}.$$

Простое (хотя и несколько утомительное) вычисление дает $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$. Однако компоненты оператора \hat{A} не коммутируют с \hat{I}^2 . Это очевидно и без вычислений: если бы было $[\hat{I}^2, \hat{A}] = 0$, то существовала бы полная система с. ф. оператора \hat{I}^2 и одной из компонент оператора \hat{A} ; эти функции были бы также с. ф. оператора отражения (имели бы определенную четность), но этого не может быть, так как операторы \hat{A} и \hat{I} не коммутируют (они антикоммутируют). Коммутативность операторов отраже-

ния \hat{I} и компонент \hat{A} с гамильтонианом и их взаимная некоммутативность объясняют (или, точнее, помогают понять) случайное вырождение уровней частицы в кулоновском поле и свойство этого случайного вырождения, состоящее в том, что энергетические уровни не имеют определенной четности (сравнить со случайным вырождением уровней осциллятора).

4.28. Учитывая вид нормированной в. ф. основного состояния $\Psi_0(r) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-r/a)$, $a = \hbar^2 / Ze^2 \mu$, находим $r^{\overline{n}} = \int r^n |\Psi_0|^2 dr = \frac{1}{\pi a^3} \int r^{n+2} \exp(-\frac{2r}{a}) dr d\Omega = \frac{(n+2)!}{2} \left(\frac{a}{2}\right)^n$.

4.29. Искомый потенциал представляет электростатический потенциал $\phi(r)$ системы, характеризуемой объемной плотностью заряда вида

$$\rho(\mathbf{r}) = e\delta(\mathbf{r}) - e|\Psi_0(r)|^2, \quad (1)$$

где Ψ_0 — в. ф. основного состояния электрона в атоме водорода (она приведена в предыдущей задаче, $Z = 1$). Первое слагаемое в (1) описывает плотность заряда, связанную с наличием протона, второе представляет объемную плотность заряда электронного «облака».

Найдем $\phi(r)$, используя общее решение уравнения Пуассона, известное из электростатики:

$$\phi(\mathbf{r}) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \frac{e}{r} - e \int \frac{|\Psi_0(r')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (2)$$

Используя формулы

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \begin{cases} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) (r'/r)^l, & r' < r, \\ \frac{1}{r'} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) (r/r')^l, & r' > r, \end{cases} \quad (3)$$

где θ — угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}' , выполним интегрирование в формуле (2), используя сферическую систему координат с полярной осью z вдоль вектора \mathbf{r} . При интегрировании по углу θ из сумм, входящих в (3), остается только первое слагаемое с $l=0$ (из-за ортогональности полиномов Лежандра), и (2) принимает вид

$$\phi(r) = \frac{e}{r} - \frac{4e}{a^3} \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r e^{-2r'/a} (r')^2 dr' + \int_r^{\infty} e^{-2r'/a} r' dr' \right\}. \quad (4)$$

Выполняя интегрирование в (4), находим

$$\phi(r) = e \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{a} \right) e^{-2r/a}. \quad (5)$$

Предельные случаи.

$$\varphi(r) \approx \frac{e}{r}, \quad r \rightarrow 0 \quad (\text{кулоновское поле протона});$$

$$\varphi(r) \approx \frac{e}{a} e^{-2r/a}, \quad r \rightarrow \infty \quad (\text{практически полная экранировка протона электроном}).$$

4.30. Искомое среднее электрическое поле представляет электростатическое поле системы, характеризуемой объемной плотностью заряда

$$\rho(\mathbf{r}) = e\delta(\mathbf{r}) - e|\Psi_{210}(\mathbf{r})|^2,$$

где $\Psi_{210}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{32\pi a^5}} r \cos \theta e^{-r/2a}$ — в. ф. $2p$ -состояния электрона ($n=2, l=1$) в атоме водорода с $m=0$, a — борковский радиус.

Как известно из электростатики, поле системы зарядов на большом расстоянии представляется в виде ряда полей мультиполей. Так как рассматриваемая система имеет равные нулю суммарный заряд и дипольный момент (см., например, 1.21), то поле системы на больших расстояниях будет полем квадруполья.

Компоненты тензора квадрупольного момента

$$D_{ik} = \int \rho(3x_i x_k - r^2 \delta_{ik}) dV = -e \int |\Psi_{210}|^2 r^4 (3n_i n_k - \delta_{ik}) dr d\Omega$$

легко найти, если написать $\cos^2 \theta = n_z n_z \equiv n_3 n_3$ и учесть

$$\int n_i n_k n_l n_m d\Omega = \frac{4\pi}{15} (\delta_{ik} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}), \quad (1)$$

так что

$$D_{ik} = -12ea^2 (3\delta_{i3} \delta_{k3} - \delta_{ik}),$$

т. е. тензор имеет диагональный вид и его отличные от нуля компоненты равны

$$D_{33} = -2D_{11} = -2D_{22} = -24ea^2 < 0.$$

Электростатический потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ и электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ находятся теперь по известным формулам электростатики.

4.31. Среднее значение напряженности электрического поля на больших расстояниях от атома, согласно 4.29, равно

$$\bar{\mathbf{E}}(\mathbf{R}) = -\nabla\varphi(R) \approx \frac{2e\mathbf{R}}{a^2 R} \exp(-2R/a), \quad (1)$$

т. е. экспоненциально убывает с увеличением расстояния.

Электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{R})$, создаваемое протоном, находящимся в начале координат, и электроном в точке \mathbf{r} , равно ($R \gg r$),

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}) = \frac{e\mathbf{R}}{R^3} - \frac{e(\mathbf{R}-\mathbf{r})}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|^3} \approx \frac{er[\mathbf{n}-3\mathbf{N}(\mathbf{n}\mathbf{N})]}{R^3}, \quad (2)$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $\mathbf{N} = \mathbf{R}/R$.

Используя представление (2) для $E_i(\mathbf{R})$ и усредняя выражение $E_i E_k$ по различным положениям электрона в пространстве, характеризующимся функцией распределения $d\omega = |\Psi_{000}(r)|^2 dV$ (Ψ_{000} — в. ф. основного состояния электрона в атоме водорода), находим

$$\overline{E_i(\mathbf{R}) E_k(\mathbf{R})} = \frac{e^2}{R^6} \int |\Psi_{000}(r)|^2 r^4 [n_i - 3N_i n_l N_l] [n_k - 3N_k n_m N_m] dr d\Omega = \frac{e^2 a^2}{R^6} (\delta_{ik} + 3N_i N_k). \quad (3)$$

Сравнение (1) и (3) показывает, что, хотя среднее поле убывает с увеличением расстояния экспоненциально, флуктуационные значения электрического поля, имеющие порядок величины $\sqrt{\overline{E^2(\mathbf{R})}}$, убывают лишь по степенному закону $\propto R^{-3}$.

4.32. Квантование в параболических координатах изложено, например, в книге [3]. Нормированные в. ф. стационарных состояний д. с. в параболических координатах

$$\xi = r + z, \quad \eta = r - z, \quad \varphi = \text{arctg}(y/x)$$

имеют вид (в этой задаче мы используем атомные единицы $e = \hbar = \mu = 1$)

$$\Psi_{n_1 n_2 m}(\xi, \eta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{n^4}} f_{n_1 m}(\xi/n) f_{n_2 m}(\eta/n) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}},$$

где $f_{nm}(x) = \frac{1}{|m|!} \sqrt{\frac{(n+|m|)!}{n!}} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) x^{|m|/2} F(-n, |m|+1, x)$, $n = (n_1 + n_2 + |m| + 1)$ — главное квантовое число.

В. ф. рассматриваемого состояния, относящегося к первому возбужденному уровню ($n = 2$), имеет вид

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{16\pi}} (1 - \xi/2) \exp\left(-\frac{\xi + \eta}{4}\right). \quad (1)$$

Для нахождения функции распределения по координате z электрона удобно перейти от переменных ξ, η, φ к цилиндрическим ρ, z, φ и проинтегрировать по плоскости, перпендикулярной оси z :

$$\begin{aligned} \omega(z) dz &= dz \int_0^\infty \int_0^{2\pi} |\Psi_{100}|^2 \rho d\rho d\varphi = \\ &= \frac{dz}{8} \int_0^\infty \left[1 - \frac{\sqrt{\rho^2 + z^2} + z}{2}\right]^2 e^{-\sqrt{\rho^2 + z^2}} \rho d\rho = \\ &= \frac{e^{-|z|}}{8} \left\{ \left[\left(\frac{|z|+z}{2}\right)^2 + \frac{1}{2} \right] (|z|+1) - |z| \frac{|z|+z}{2} \right\} dz. \quad (2) \end{aligned}$$

С помощью (2) находим вероятности нахождения электрона в полупространствах $z \geq 0$ и $z \leq 0$:

$$W(z \geq 0) = \int_0^{\infty} w(z) dz = 7/8, \quad W(z \leq 0) = 1/8,$$

а также \bar{z} и средний дипольный момент атома:

$$\bar{z} = 3, \quad \bar{d}_x = \bar{d}_y = 0, \quad \bar{d}_z = -\bar{z} = -3 \text{ ат. ед.} = -3\hbar^2/\mu e.$$

Записав в. ф. (1) в виде

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{16\pi}} \left(1 - \frac{r + r \cos \theta}{2} \right) \exp(-r/2)$$

и учтя явный вид в. ф. $\Psi_{n_r l m}$ электрона в атоме водорода, легко найти, что в рассматриваемом состоянии момент электрона может принимать два значения $l=0; 1$ с одинаковой вероятностью $W(l=0) = W(l=1) = 1/2$.

4.33. Представив в. ф. в виде $\Psi_{n_r l m} = Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{n_r l}(r)/\sqrt{r}$, находим из у. Ш.

$$\chi_{n_r l}'' + \frac{1}{r} \chi_{n_r l}' + \left[\chi_{n_r l}^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} \right] \chi_{n_r l} = 0 \quad \left(E_{n_r l} = \frac{\hbar^2 \chi_{n_r l}^2}{2\mu} \right)$$

с граничными условиями $\chi_{n_r l}(0) = \chi_{n_r l}(a) = 0$ радиальную в. ф. и энергетические уровни частицы:

$$\chi_{n_r l}(r) = C J_{l+1/2}(\chi_{n_r l} r), \quad E_{n_r l} = \frac{\hbar^2 \alpha_{n_r l}^2}{2\mu a^2}, \quad \chi_{n_r l} a = \alpha_{n_r l},$$

где $\alpha_{nl} > 0$ — n -й корень (в порядке возрастания, не считая нуля при $x=0$) функции Бесселя $J_{l+1/2}(x)$, т. е. $J_{l+1/2}(\alpha_{nl}) = 0$. В частности, основному состоянию ($n_r=0, l=0$) соответствует значение $\alpha_{10} = \pi$ ($J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x$).

4.34. Представив в. ф. в виде $\Psi_{n_r l m} = Y_{lm} \chi_{n_r l}/\sqrt{r}$, находим из у. Ш. ($E_{n_r l} = -\hbar^2 \chi_{n_r l}^2/2\mu < 0$)

$$\chi_{n_r l}'' + \frac{1}{r} \chi_{n_r l}' + \left[\chi_{n_r l}^2 + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2} \delta(r-a) - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} \right] \chi_{n_r l} = 0$$

радиальную в. ф.

$$\chi_{n_r l}(r) = \begin{cases} C_1 I_{l+1/2}(\chi_{n_r l} r), & r < a, \\ C_2 K_{l+1/2}(\chi_{n_r l} r), & r > a. \end{cases} \quad (1)$$

Условия сшивания функции (1) в точке $r=a$ (совершенно аналогичные условиям сшивания в случае одномерного δ -функ-

ционного потенциала, установленным в 2.10) приводят к соотношению

$$I_{l+1/2}(\kappa_{n_r} a) K_{l+1/2}(\kappa_{n_r} a) = \frac{\hbar^2}{2\mu a a}. \quad (2)$$

определяющему энергетический спектр частицы (сравнить с 4.11).

В задаче 4.11 отмечалось, что функция $F_\nu(x) \equiv I_\nu(x) K_\nu(x)$ на полуоси $x \geq 0$ является монотонно убывающей функцией, причем при $x \rightarrow \infty$ эта функция стремится к нулю, а при $x \rightarrow 0$ принимает максимальное значение, равное $F_\nu(0) = 1/2\nu$ ($\nu > 0$). Поэтому уравнение (2) при фиксированном значении l имеет либо один корень, если $\mu a a / \hbar^2 > l + 1/2$, либо вообще не имеет корней, если указанное условие не выполняется. Таким образом, условие $\mu a a / \hbar^2 > l + 1/2$ является условием существования состояний д. с. с моментом l .

Очевидно, что число уровней N дискретного спектра частицы в рассматриваемом поле определяется условием

$$\mu a a / \hbar^2 - 1/2 < N < \mu a a / \hbar^2 + 1/2.$$

4.35. Если в. ф. $\Psi_{n_r, lm}$ для стационарных s -состояний ($l = 0$) частицы представить в виде $\Psi_{n_r, 00} = R_{n_r}(r)/r$ и сделать замену переменной $x = \exp(-r/2a)$, то у. Ш. принимает вид

$$\frac{d^2}{dx^2} R_{n_r} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} R_{n_r} + \left[\lambda^2 - \frac{p^2}{x^2} \right] R_{n_r} = 0, \quad (1)$$

где

$$\lambda = \sqrt{\frac{8\mu U_0 a^2}{\hbar^2}} > 0, \quad p = \sqrt{-\frac{8\mu E_{n_r, 0} a^2}{\hbar^2}} > 0.$$

Решение уравнения (1) имеет вид

$$R_{n_r} = C_1 J_p(\lambda x) + C_2 J_{-p}(\lambda x)$$

($J_p(x)$ — функция Бесселя). Так как при $r \rightarrow \infty$ (при этом $x \rightarrow 0$) в. ф. $\Psi_{n_r, 00}$ должна обращаться в нуль, то необходимо выбрать $C_2 = 0$. При этом требование ограниченности в. ф. в точке $r = 0$ приводит к условию

$$J_p(\lambda) = 0, \quad \text{или} \quad J_{\sqrt{-8\mu a^2 E_{n_r, 0} / \hbar^2}} \left(\sqrt{\frac{8\mu a^2 U_0}{\hbar^2}} \right) = 0, \quad (2)$$

определяющему энергетический спектр s -состояний частицы.

Так как положение на оси x первого нуля функции Бесселя $J_p(x)$ с ростом p смещается вправо ($p \geq 0$, $x > 0$; нуль при $x = 0$ исключается из рассмотрения) и минимальное значение, равное $x_1 \approx 2,40$, имеет первый нуль функции Бесселя с индексом $p = 0$: $J_0(x_1) = 0$, то условие существования в рассматриваемом поле s -состояний д. с. (а тем самым и состояний д. с.

вообще) имеет вид

$$U_0 \geq \frac{\hbar^2 x_1^2}{8\mu a^2} \approx 0,72 \frac{\hbar^2}{\mu a^2}. \quad (3)$$

Учитывая, что новые состояния д. с., появляющиеся по мере углубления ямы, имеют малую энергию связи (в условиях, когда уровень только появился), из формулы (2) получаем значения параметров ямы, отвечающие появлению в ней N -го s -состояния д. с.:

$$J_0\left(\sqrt{\frac{8\mu a^2 U_0}{\hbar^2}}\right) = 0, \quad U_0 = \frac{\hbar^2 x_N^2}{8\mu a^2}, \quad (4)$$

где x_N — N -й корень функции $J_0(x)$. В частности, при $N \gg 1$, используя асимптотическое представление функции $J_0(x)$, находим

$$x_N \approx \pi N - \pi/4. \quad (5)$$

Соответственно число s -состояний д. с. для частицы в глубокой яме определяется условием

$$N < \sqrt{\frac{8\mu a^2 U_0}{\pi^2 \hbar^2}} + \frac{1}{4} < N + 1.$$

4.36. Если представить в. ф. в виде $\Psi_{n_r, 00} = R_{n_r}(r)/r$, то у. Ш. для функции R_{n_r} и граничное условие $R_{n_r}(0) = 0$ имеют точно такой же вид, как в случае одномерного движения. Поэтому, как легко сообразить,

$$E_{n_r, 0} = E_{n_r}, \quad \Psi_{n_r, 00}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi} r} R_{n_r}(r).$$

Учитывая установленное соответствие и результат задачи 2.20, находим, что условие существования в указанном поле s -состояний д. с. (а тем самым и состояний дискретного спектра вообще) имеет вид $\mu a^2 U_0 / \hbar^2 \geq \pi^2 / 8$.

4.37. При $r \rightarrow \infty$ в. ф. $\Psi_{E=0, l=0}(r)$ имеет, вообще говоря, поведение вида $\Psi_{00} \rightarrow \text{const}$ (что соответствует поведению в. ф. $\Psi_{E=0} \propto x$ при $x \rightarrow \infty$ в одномерном случае, см. 2.18). Однако если параметры поля выбраны таким образом, что при малейшем углублении в поле появляется новое (или первое, если состояния д. с. отсутствовали) состояние д. с., то в. ф. при таких значениях параметров поля имеет при $r \rightarrow \infty$ вид $\Psi_{00}(r) \approx a/r$ (отметим, что для справедливости высказанных утверждений требуется достаточно быстрое убывание потенциала при $r \rightarrow \infty$: он должен убывать быстрее, чем r^{-2}).

Для указанного потенциала у. Ш. при $E = 0$ и $l = 0$ имеет вид

$$R'' + \frac{2\mu a}{\hbar^2 r^2} R = 0 \quad (a < r < \infty) \quad (1)$$

($\Psi_{00} = R(r)/r$). Решение уравнения (1) следующим образом выражается через цилиндрические функции [12]:

$$R(r) = C_1 \sqrt{r} J_\nu(\beta r^{-1/2\nu}) + C_2 \sqrt{r} N_\nu(\beta r^{-1/2\nu}), \quad (2)$$

где

$$\nu = \frac{1}{n-2} > 0, \quad \beta = 2\nu \sqrt{2\mu\alpha/\hbar^2}.$$

Первое слагаемое в (2) при $r \rightarrow \infty$ принимает постоянное значение, а второе расходится пропорционально r . Поэтому определение параметров поля, соответствующих появлению новых s -состояний д. с., требует выбора $C_2 = 0$. При этом граничное условие $R(a) = 0$ в неявном виде определяет искомые значения параметров потенциала:

$$J_\nu(\beta a^{-1/2\nu}) = 0. \quad (3)$$

Наименьшее значение корня функции Бесселя в (3) определяет параметры потенциала, при которых появляется первое s -состояние д. с. (а тем самым и первое состояние д. с. вообще). В частности, при $n = 3$ имеем $\nu = 1$ и, учитывая значение $x_1 = 3,83$ первого корня функции $J_1(x)$ (не считая $x = 0$), находим условие существования состояний д. с. в поле рассматриваемого вида при $n = 3$:

$$\mu\alpha/a\hbar^2 \geq x_1^2/8 \approx 1,83.$$

4.38. Обозначим через $E_n(\lambda)$ энергию n -го уровня в поле вида

$$U(r, \lambda) = U(r) + \lambda\delta U(r).$$

На основании результата задачи 1.28 имеем

$$\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \left(\frac{\partial H}{\partial \lambda} \right)_{nn} = (\delta U)_{nn} \geq 0,$$

и утверждение задачи очевидно, так как $E_n = E_n(\lambda = 0)$, $E_n = E_n(\lambda = 1)$ (знак равенства в установленном соотношении реализуется только при $\delta U \equiv 0$).

4.39. Как известно (см., например, [3]), в поле $U = -\alpha/r^2$ при $\mu\alpha < \hbar^2/8$ состояния д. с. отсутствуют, а при $\mu\alpha > \hbar^2/8$ имеет место падение частицы на центр поля.

Так как $-U_0/\text{sh}^2(r/a) \geq -U_0 a^2/r^2$, то, согласно предыдущей задаче, можно утверждать, что при условии $\mu a^2 U_0 < \hbar^2/8$ в рассматриваемом поле отсутствуют состояния д. с. В случае же $\mu a^2 U_0 > \hbar^2/8$ имеет место падение частицы на центр поля, так как при $r \rightarrow 0$ имеем $U(r) \approx -U_0 a^2/r^2$, а условие падения определяется лишь поведением потенциала на малых расстояниях $r \rightarrow 0$.

4.40. Рассмотрение, аналогичное проведенному при решении задачи 2.22, приводит к следующему среднему значению:

$$\overline{(p)}_{n,r,l} = -\frac{1}{4\pi a^2} \frac{\partial E_{n,r,l}}{\partial a} = \frac{1}{2\pi a^3} E_{n,r,l}.$$

4.41. Имея в виду общие соображения о простейших вариационных расчетах энергии основного состояния частицы, высказанные при решении задачи 2.27, находим:

а) $|C|^2 = (2\kappa^2/\pi)^{3/2}$ — из условия нормировки пробной в. ф.,

$$\bar{T} = \frac{\bar{p}^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int |\nabla\Psi|^2 dV = \frac{3\hbar^2\kappa^2}{2\mu},$$

$$\bar{U} = -\frac{\bar{a}}{r} = -\alpha \int \frac{1}{r} |\Psi|^2 dV = -\sqrt{\frac{8}{\pi}} \alpha\kappa.$$

Минимизируя значение $\bar{E}(\kappa) = \bar{T} + \bar{U}$ по κ , находим

$$(E_0)_{\text{вар}} = \min \bar{E}(\kappa) = -\frac{4}{3\pi} \frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2} \approx -0,42 \frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2}. \quad (1)$$

б) $|C|^2 = \frac{15}{2\pi a^5}$, $\bar{T} = \frac{5\hbar^2}{\mu a^2}$, $\bar{U} = -\frac{5\alpha}{2a}$,

$$(E_0)_{\text{вар}} = -\frac{5}{16} \frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2} \approx -0,31 \frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2}. \quad (2)$$

Значения (1), (2) величины $(E_0)_{\text{вар}}$, по смыслу вычислений, представляют приближенное значение E_0 энергии основного состояния частицы в кулоновском поле. Точное значение $E_0 = -\mu\alpha^2/2\hbar^2$.

Так как вариационный расчет энергии основного состояния всегда приводит к несколько завышенному значению E_0 ($E_0 \leq (E_0)_{\text{вар}}$), то с самого начала, даже не зная точного значения E_0 , можно было утверждать, что значение (1) более близко к точному, чем (2).

4.42. а) $|C|^2 = \alpha^3/\pi$ — из условия нормировки пробной в. ф.,

$$\bar{T} = \hbar^2\alpha^2/2\mu, \quad \bar{U} = 3k/2\alpha^2, \quad (1)$$

$$(E_0)_{\text{вар}} = \min \bar{E}(\alpha) = \sqrt{3} \hbar\omega \approx 1,73\hbar\omega;$$

б) $|C|^2 = \frac{15}{2\pi a^5}$, $\bar{T} = \frac{5\hbar^2}{\mu a^2}$, $\bar{U} = \frac{ka^2}{7}$,

$$(E_0)_{\text{вар}} = \min \bar{E}(a) = 2\sqrt{\frac{5}{7}} \hbar\omega \approx 1,69\hbar\omega. \quad (2)$$

Результаты (1), (2) простейшего вариационного расчета энергии основного состояния осциллятора следует сравнить с точным значением $E_0 = 3\hbar\omega/2$ (см., например, 4.23).

4.43. Указанная пробная функция описывает состояние частицы с моментом $l=1$. Она, как и точная в. ф. состояния с $n_r=0$, $l=1$, имеет требуемое поведение при $r \rightarrow 0$ ($\Psi \propto r^l$), и ее радиальная часть не имеет нулей. Поэтому можно ожидать, что среднее значение энергии частицы после минимизации по вариационному параметру κ будет достаточно близким к точному значению $E_{n_r=0, l=1}$. Вычисляя интегралы в сферических

координатах и учитывая соотношение

$$\int n_i n_k d\Omega = \frac{4\pi}{3} \delta_{ik},$$

после довольно простых расчетов находим:

$|\mathbf{a}|^2 = 8\kappa^5 \sqrt{2/\pi^3}$ — из условия нормировки пробной в. ф.,

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int |\nabla\Psi|^2 dV = \frac{5\hbar^2\kappa^2}{2\mu}, \quad \bar{U} = -\frac{\bar{a}}{r} = -\frac{4\sqrt{2}\alpha\kappa}{3\sqrt{\pi}}, \\ (E_{01})_{\text{вар}} &= \min \bar{E}(\kappa) = -\frac{16}{45\pi} \frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2} = -0,113 \frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Последний результат следует сравнить с точным значением рассматриваемой величины, равным $-\mu\alpha^2/8\hbar^2 = -0,125\mu\alpha^2/\hbar^2$.

4.44. С учетом замечаний к решению предыдущей задачи находим

$$\begin{aligned} |\mathbf{a}|^2 &= \frac{\alpha^2}{\pi}, \quad \bar{T} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}, \quad \bar{U} = \frac{15k}{4\alpha^2}, \\ (E_{01})_{\text{вар}} &= \min \bar{E}(\alpha) = \frac{\sqrt{30}}{2} \hbar\omega = 2,74\hbar\omega. \end{aligned} \quad (1)$$

Точное значение рассчитываемой энергии равно $5\hbar\omega/2$.

4.45. Функция Грина удовлетворяет уравнению ($E = -\hbar^2\kappa^2/2\mu < 0$)

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} (-\Delta + \kappa^2) G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1)$$

Из соображений симметрии представляется очевидным, что она является функцией вида $G_E = f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ (т. е. зависит только от $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$). При этом функция $f(r)$ удовлетворяет уравнению

$$(-\Delta + \kappa^2) f(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \delta(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Так как в сферических координатах $\Delta = \Delta_r + \Delta_{\theta, \varphi}$, $\Delta_r = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r$, уравнение (2) при $r \neq 0$ можно записать в виде

$$\frac{d^2}{dr^2} (rf) - \kappa^2 (rf) = 0.$$

Его решение:

$$f(r) = \frac{C_1}{r} e^{-\kappa r} + \frac{C_2}{r} e^{\kappa r} \quad (\kappa > 0).$$

Условие убывания функции Грина при $r \rightarrow \infty$ требует выбора $C_2 = 0$, а соотношение $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$ позволяет определить значение постоянной C_1 и окончательный вид G_E :

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (3)$$

С помощью функции Грина у. Ш. для состояний д. с. можно записать в виде интегрального уравнения:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}) &= - \int G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') dV' = \\ &= - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') dV'\end{aligned}\quad (4)$$

(сравнить с решением задачи 2.36).

4.46. Применим уравнение (4) предыдущей задачи к в. ф. основного состояния частицы ($l=0$) с $E_0 < 0$, считая, что такое состояние существует. Так как в. ф. $\Psi_0(r)$ основного состояния сферически симметрична и не имеет нулей (так что, не ограничивая общности рассмотрения, ее можно считать неотрицательной, $\Psi_0(r) \geq 0$), то в уравнении

$$\Psi_0(r) = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} [-U(r')] \Psi_0(r') dV' \quad (1)$$

подынтегральное выражение тоже является неотрицательным.

Обозначив через r_0 значение r , при котором функция Ψ_0 принимает максимальное значение, имеем из (1) неравенство

$$\Psi_0(r) \leq \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \Psi_0(r_0) \int \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} |U(r')| dV', \quad (2)$$

справедливое при любом значении переменной r (в том числе и при $r = r_0$).

Учитывая соотношение

$$\int \frac{d\Omega'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \min \left\{ \frac{4\pi}{r}, \frac{4\pi}{r'} \right\} \leq \frac{4\pi}{r'},$$

которое получается интегрированием по углам разложения $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$ по полиномам Лежандра, приведенного в 4.29, находим из (2)

$$\frac{\Psi_0(r)}{\Psi_0(r_0)} \leq \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty r' |U(r')| dr', \quad (3)$$

и так как максимальное значение левой части этого соотношения равно 1, то из (3) непосредственно следует искомое необходимое условие существования состояний дискретного спектра в поле $U(r)$.

Имея в виду связь энергетического спектра частицы в центральном поле со спектром в одномерном случае, установленную в 4.36, легко заметить, что результат данной задачи является аналогом результата задачи 2.40 для одномерного движения.

а) Необходимое условие: $\xi = \mu a^2 U_0 / \hbar^2 \geq 1$;
точное условие: $\xi \geq \pi^2 / 8 = 1,24$.

б) $\xi = \mu a^2 U_0 / \hbar^2 \geq 1/2$ ($\xi \geq 0,72$ — точное условие).

4.47. Применим уравнение (4) задачи 4.45 к в. ф. состояния д. с. с квантовыми числами $n_r = 0$ и произвольным l , считая, что такое состояние существует. Рассмотрим, для определенности, значение $m = 0$, так что в. ф. имеет вид

$$\Psi_{n_r=0, l, m=0} = P_l(\cos \theta) f_l(r), \quad (1)$$

а исходное уравнение —

$$P_l(\cos \theta) f_l(r) = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{-\kappa|r-r'|}}{|r-r'|} [-U(r')] P_l(\cos \theta') f_l(r') dV'. \quad (2)$$

Функция $f_l(r)$ в (1) не имеет нулей (не считая нулей при $r = 0, \infty$), и, не ограничивая общности, ее можно считать неотрицательной, $f_l \geq 0$. Так как нас интересует условие существования состояний д. с., которые появляются по мере углубления ямы, а в условиях, когда уровень только появился, он имеет сколь угодно малую энергию связи, то, имея в виду именно такую ситуацию, можно в уравнении (2) заменить $\exp(-\kappa|r-r'|)$ единицей. Далее, используя разложение $|r-r'|^{-1}$ в ряд по полиномам Лежандра, приведенное при решении задачи 4.29, и учитывая теорему сложения для полиномов Лежандра

$$P_l(\cos \gamma) = P_l(\cos \theta) P_l(\cos \theta') + \sum_{m=1}^l 2 \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \theta) P_l^m(\cos \theta') \cos m(\varphi - \varphi'),$$

$$\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')$$

(γ — угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}'), в правой части уравнения (2) можно выполнить интегрирование по углам и получить неравенство (сравнить с решением предыдущей задачи)

$$f_l(r) \leq \frac{2\mu}{(2l+1)\hbar^2} \int_0^\infty f_l(r') |U(r')| r' dr'. \quad (3)$$

Взяв в (3) значение r равным r_0 , при котором $f_l(r)$ принимает максимальное значение, и вынося из-под знака интеграла функцию $f_l(r')$ в точке $r' = r_0$ (от чего неравенство (3) может только усилиться), легко приходим к искомому условию

$$\int_0^\infty r |U(r)| dr \geq \frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu}.$$

4.48. Найдем среднее значение энергии частицы в рассматриваемом состоянии ($|C|^2 = \kappa^3/\pi$ — из условия нормировки

пробной в. ф.):

$$\bar{T} = \hbar^2 \kappa^2 / 2\mu, \quad \bar{U} = 4\kappa^3 \int_0^\infty r^2 U(r) e^{-2\kappa r} dr, \quad \bar{E} = \bar{T} + \bar{U}.$$

Так как $E_0 \leq \bar{E}$ (E_0 — энергия основного состояния), то при $\bar{E} \leq 0$ в поле заведомо имеется хотя бы одно состояние д. с. Таким образом, если при каком-либо значении параметра $\kappa > 0$ выполнено неравенство

$$\kappa \int_0^\infty |U(r)| r^2 e^{-2\kappa r} dr \geq \hbar^2 / 8\mu, \quad (1)$$

то в поле имеется состояние д. с.

Очевидно, что оптимальным значением параметра κ (при котором выполняется условие (1)) является такое, при котором выражение в левой части (1) как функция κ принимает максимальное значение. Так что искомое достаточное условие существования состояний д. с. принимает вид

$$\max \left\{ \kappa \int_0^\infty |U(r)| r^2 e^{-2\kappa r} dr \right\} \geq \hbar^2 / 8\mu. \quad (2)$$

а) Условие (2) принимает вид

$$\max \{ \alpha \kappa a^2 e^{-2\kappa a} \} \geq \frac{\hbar^2}{8\mu}, \quad \text{или} \quad \xi = \frac{\alpha a \mu}{\hbar^2} \geq \frac{e}{4} \approx 0,68.$$

Точное условие существования состояний д. с.: $\xi \geq 0,5$.

б) $\xi = \frac{\mu a^2 U_0}{\hbar^2} \geq \frac{27}{32} \approx 0,84$ — достаточное условие; $\xi \geq 0,72$ — точное условие существования состояний д. с.

4.49. а) $\xi_n = 0,5$; $\xi_0 = 0,5$; $\xi_d = e/4 \approx 0,68$;

б) $\xi_n = 0,5$; $\xi_0 \approx 0,72$; $\xi_d = 27/32 \approx 0,84$;

в) $\xi_n = 0,5$; $\xi_0 = 0,84$; $\xi_d = 1$.

Отметим, что, как и следовало ожидать, $\xi_n \leq \xi_0 \leq \xi_d$.

4.50. Вычисления, аналогичные проведенным при решении задачи 4.48, приводят к достаточному условию существования состояний д. с. вида $\xi = \mu a^2 U_0 / \hbar^2 \geq \frac{9\sqrt{3}}{8} \approx 1,94$.

Необходимое условие: $\xi \geq 1$; точное условие (результат численного расчета на ЭВМ): $\xi \geq 1,34$.

4.51. Достаточное условие существования хотя бы одного уровня энергии д. с. с моментом $l = 1$ имеет вид

$$\max \left\{ \kappa^3 \int_0^\infty r^4 |U(r)| e^{-2\kappa r} dr \right\} \geq \frac{3\hbar^2}{8\mu}. \quad (1)$$

Для потенциала Юкавы условие (1) принимает вид $\xi = \mu\alpha a/\hbar^2 \geq 128/27 \approx 4,74$, а необходимое условие, согласно 4.47, дает $\xi \geq 3/2$.

4.52. В. ф. $\Phi_0(\mathbf{p})$ основного состояния частицы в импульсном представлении имеет вид

$$\begin{aligned}\Phi_0(\mathbf{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi_0(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} dV = \\ &= \sqrt{\frac{8\hbar^5}{\pi^2 a^5}} \frac{1}{(p^2 + \hbar^2/a^2)^2} \quad \left(a = \frac{\hbar^2}{\mu\alpha}\right).\end{aligned}$$

Распределение по импульсам частицы: $d\omega(\mathbf{p}) = |\Phi_0(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}$.

4.53. Нормированная в. ф. основного состояния частицы, согласно результату задачи 4.33, имеет вид ($n_r = 0, l = 0$)

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{\sin(\pi r/a)}{r}, \quad r \leq a.$$

В. ф. в импульсном представлении

$$\Phi_0(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi_0(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} dV = \frac{(a\hbar^3)^{1/2}}{p} \frac{\sin(pa/\hbar)}{\pi^2 \hbar^2 - p^2 a^2}$$

определяет функцию распределения по импульсам частицы

$$d\omega = |\Phi_0(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} = \frac{a\hbar^3}{p^2} \frac{\sin^2(pa/\hbar)}{(\pi^2 \hbar^2 - p^2 a^2)^2} d\mathbf{p}.$$

4.54. У. Ш. в импульсном представлении имеет вид (см. задачу 2.33)

$$\frac{p^2}{2\mu} \Phi(\mathbf{p}) + \int \tilde{U}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \Phi(\mathbf{p}') d\mathbf{p}' = E\Phi(\mathbf{p}), \quad (1)$$

где

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int U(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}/\hbar) dV.$$

Для δ -функционального потенциала имеем

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = -\frac{\alpha}{(2\pi\hbar)^3} \int \delta(r-a) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/\hbar} dV = -\frac{\alpha a}{2\pi^2 \hbar^2} \frac{\sin(aq/\hbar)}{q}. \quad (2)$$

Подставив (2) в уравнение (1) и учтя, что для состояний с $l = 0$ в. ф. $\Phi(p)$ не зависит от угловых переменных, запишем его в виде

$$\begin{aligned}\left(\frac{p^2}{2\mu} - E\right)\Phi(p) - \frac{\alpha a}{\pi\hbar^2} \int \frac{\sin\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{p^2 + \tilde{p}^2 - 2p\tilde{p}\cos\theta}\right)}{\sqrt{p^2 + \tilde{p}^2 - 2p\tilde{p}\cos\theta}} \times \\ \times \Phi(\tilde{p}) \tilde{p}^2 \sin\theta d\theta d\tilde{p} = 0.\end{aligned} \quad (3)$$

После элементарного интегрирования по углу θ уравнение (3) принимает вид

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} - E\right) \Phi(p) - \frac{2\alpha}{\pi\hbar p} \sin\left(\frac{pa}{\hbar}\right) \int_0^\infty \sin\left(\frac{\tilde{p}a}{\hbar}\right) \Phi(\tilde{p}) \tilde{p} d\tilde{p} = 0. \quad (4)$$

Обозначив в уравнении (4)

$$\int_0^\infty \sin(\tilde{p}a/\hbar) \Phi(\tilde{p}) \tilde{p} d\tilde{p} = C, \quad (5)$$

запишем его решение:

$$\Phi(p) = \frac{4\mu\alpha C}{\pi\hbar(p^2 - 2\mu E)} \frac{\sin(pa/\hbar)}{p}. \quad (6)$$

Условие согласования выражений (5) и (6) приводит к соотношению

$$\frac{4\mu\alpha}{\pi\hbar} \int_0^\infty \frac{\sin^2(pa/\hbar)}{p^2 - 2\mu E} dp = 1, \quad (7)$$

определяющему уровни энергии д. с. $E = -\hbar^2\kappa^2/2\mu < 0$.

Перепишав соотношение (7) в виде

$$\frac{\mu\alpha}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^\infty \frac{1 - \cos(2pa/\hbar)}{p^2 + \hbar^2\kappa^2} dp = 1 \quad (8)$$

и вычисляя интеграл с помощью теоремы о вычетах (используя еще соотношение $\cos x = (e^{ix} + e^{-ix})/2$), находим

$$\frac{\mu\alpha a}{\hbar^2} (1 - e^{-2a\kappa}) = a\kappa. \quad (9)$$

Соотношение (9), определяющее энергетический спектр s -состояний д. с., естественно, эквивалентно аналогичному условию (2) задачи 4.34 при $l=0$, полученному из решения у. Ш. в координатном представлении.

Из соотношения (9) следует, что при $\xi = \mu\alpha a/\hbar^2 > 1/2$ в яме имеется одно s -состояние д. с., а при $\xi < 1/2$ состояний д. с. нет (яма не может «связать» частицу).

4.55. Решение данной задачи может быть получено в результате простых замен в формулах решения предыдущей задачи.

Для этого достаточно учесть два обстоятельства.

1. Решение исходного уравнения — уравнения (1) предыдущей задачи — должно удовлетворять условию $\Phi(p) = 0$ при $p \leq p_0$. Поэтому формулы (3)—(5), (7) предыдущей задачи сохраняют свою силу и в условиях данной задачи, если в них нижний предел интегрирования по переменной p (равный нулю) заменить на значение p_0 (при этом в. ф. имеет вид, приведенный в выражении (6) предыдущей задачи, лишь при $p \geq p_0$).

2. Связанному состоянию (состоянию д. с.) теперь отвечают значения энергии частицы $E < E_0 = p_0^2/2\mu$ (а не $E < 0$, как было в предыдущей задаче), так как именно величина E_0 представляет минимальное значение энергии «свободных» частиц. Поэтому энергетические уровни д. с. частицы определяются из уравнения

$$\frac{4\mu\alpha}{\pi\hbar} \int_{p_0}^{\infty} \frac{\sin^2(pa/\hbar)}{p^2 - 2\mu E} dp = 1, \quad (1)$$

причем искомые значения E должны удовлетворять условию $E < E_0$.

Легко заметить, что уравнение (1) при любых значениях параметров потенциала (но, естественно, $\alpha > 0$) имеет одно (и только одно) решение, так как левая часть уравнения (1) как функция переменной E монотонно возрастает с увеличением E от значения, равного нулю, при $E \rightarrow -\infty$ до значения $+\infty$ при $E \rightarrow E_0$ (предполагается, что $p_0 \neq \pi\hbar/a$).

Для нахождения величины энергии связи частицы $\varepsilon = E_0 - E > 0$ в случае мелкой ямы $\xi = \mu\alpha a/\hbar^2 \ll 1$ замечаем, что при $\xi \rightarrow 0$ из уравнения (1) следует, что $E \rightarrow E_0$, $\varepsilon \rightarrow 0$ (при $\varepsilon = 0$ интеграл в (1) расходится на нижнем пределе), и значение интеграла в (1) определяется областью значений p , близких к нижнему пределу.

Таким образом, при $\varepsilon \rightarrow 0$ имеем

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin^2(pa/\hbar) dp}{p^2 - p_0^2 + 2\mu\varepsilon} \approx \sin^2\left(\frac{p_0 a}{\hbar}\right) \int_{p_0}^{\infty} \frac{dp}{p^2 - p_0^2 + 2\mu\varepsilon} \approx -\frac{\sin^2(p_0 a/\hbar)}{2p_0} \ln \frac{\varepsilon}{4E_0} \quad (2)$$

и из уравнения (1) при $\xi \ll 1$ находим энергию связи частицы:

$$\varepsilon \sim E_0 \exp\{-\pi p_0 a/2\xi\hbar \sin^2(p_0 a/\hbar)\}. \quad (3)$$

Поскольку при вычислении интеграла (2) для $\varepsilon \rightarrow 0$ мы ограничились лишь вычислением сингулярной (расходящейся) части интеграла, то формула (2) справедлива с точностью до некоторого постоянного (при $\varepsilon \rightarrow 0$) слагаемого (которое мы не вычисляем). Поэтому в формуле (3) мы не пишем приближенного равенства, имея в виду, что для вычисления предэкспоненциального множителя следовало бы провести более точное вычисление интеграла (2).

Отметим, что при $\xi \rightarrow 0$ энергия связи частицы стремится к нулю по экспоненциальному закону: $\varepsilon \sim E_0 \exp(-c/\xi)$.

4.56. Представив в. ф. стационарных состояний частицы с $l=0$ в виде $\Psi_{k, l=0, m=0} = R_k(r)/r$, где $k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2}$, получаем для функции R_k уравнение

$$-R_k'' + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2} \delta(r-a) R_k = k^2 R_k. \quad (1)$$

Для нахождения квазидискретных уровней следует найти такие решения уравнения (1), которые при $r \rightarrow \infty$ имеют вид $R_k(r) \propto \exp(ikr)$ (как известно, в такой постановке задачи решение существует лишь при некоторых комплексных значениях величины $k = k_1 - ik_2$, $k_{1,2} > 0$; при этом $E = E_0 - i\Gamma/2$, E_0 — энергия уровня, $\Gamma = 2\hbar^2 k_1 k_2 / \mu$ — его ширина).

Решение уравнения (1), удовлетворяющее требуемым условиям, имеет вид

$$R_k(r) = \begin{cases} C_1 \sin(kr), & r < a, \\ C_2 \exp(ikr), & r > a. \end{cases} \quad (2)$$

Условия сшивания в.ф. в точке $r = a$ (см. 2.10) приводят к соотношению

$$ika - ka \operatorname{ctg} ka = \frac{2\mu\alpha a}{\hbar^2}, \quad (3)$$

определяющему спектр квазидискретных уровней (с $l = 0$).

Из уравнения (3) в случае $\xi = \mu\alpha a / \hbar^2 \gg 1$ следует, что значения величины ka для нижних уровней (таких, что $|ka| \ll \xi$) близки к $(n+1)\pi$, и, представив значения корней уравнения (3) в виде

$$k_n a = (n+1)\pi + \varepsilon_1 - i\varepsilon_2 \quad (n = 0, 1, \dots; |\varepsilon_{1,2}| \ll 1),$$

из (3) легко находим приближенные значения ε_1 и ε_2 :

$$\varepsilon_1 \approx -\frac{(n+1)\pi}{2\xi}, \quad \varepsilon_2 \approx \varepsilon_1^2 \approx \frac{(n+1)^2 \pi^2}{4\xi^2},$$

а с ними и энергию E_0 квазидискретного уровня и его ширину Γ :

$$(E_0)_n \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2\mu a^2} \left(1 - \frac{1}{\xi}\right), \quad \Gamma_n \approx \frac{\hbar^2 \pi^3 (n+1)^3}{2\mu a^2 \xi^2}.$$

Энергии квазидискретных уровней близки к энергетическим уровням частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме радиуса a (см. 4.33). При $\xi \rightarrow \infty$, когда потенциальный барьер становится непрозрачным для частиц, квазидискретные уровни переходят в соответствующие уровни д.с.

Глава 5

СПИН

5.1. С. ф. $\Psi_{s_x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ и с. з. s_x оператора $\hat{s}_x = \hat{\sigma}_x / 2$ находятся из решения уравнения

$$\hat{s}_x \Psi_{s_x} = s_x \Psi_{s_x}; \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

откуда

$$b = 2s_x a, \quad a = 2s_x b. \quad (1)$$

Нетривиальное решение системы уравнений (1) существует только при условии $4s_x^2 = 1$, определяющем возможные значения (спектр) величины $s_x = \pm 1/2$. Из (1) имеем: $a = b$ при $s_x = 1/2$ и $a = -b$ при $s_x = -1/2$. Нормированные на единицу $\|\Psi_{s_x}\|^2 = |a|^2 + |b|^2 = 1$ с. ф. Ψ_{s_x} имеют вид

$$\Psi_{s_x=+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{s_x=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Аналогично находим

$$\Psi_{s_y=+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad \Psi_{s_y=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{s_z=+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{s_z=-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

5.2. Оператор спина $\hat{s} = \hat{\sigma}/2$ является оператором векторной (точнее, псевдовекторной) величины; поэтому оператор проекции спина \hat{s}_n на произвольное направление \mathbf{n} ($\mathbf{n}^2 = 1$) должен выражаться через операторы компонент спина $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ так же, как и в случае обычного (неоператорного) вектора, т. е.

$$\hat{s}_n = \mathbf{n}\hat{s} = \frac{1}{2} \mathbf{n}\hat{\sigma} = \frac{1}{2} (\sin \theta \cos \varphi \cdot \hat{\sigma}_x + \sin \theta \sin \varphi \cdot \hat{\sigma}_y + \cos \theta \cdot \hat{\sigma}_z),$$

где θ, φ — полярный и азимутальный углы, определяющие направление вектора \mathbf{n} . Используя явный вид матриц Паули, оператор \hat{s}_n можно представить в виде квадратной двухрядной матрицы:

$$\hat{s}_n = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cdot e^{-i\varphi} \\ \sin \theta \cdot e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

Значение \bar{s}_n в состоянии Ψ_{s_z} с определенным значением s_z проекции спина на ось z при $s_z = +1/2$ равно

$$\bar{s}_n = \frac{1}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cdot e^{-i\varphi} \\ \sin \theta \cdot e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cos \theta.$$

Аналогично, при $s_z = -1/2$ находим $\bar{s}_n = -(\cos \theta)/2$.

Отметим, что значение $\bar{s}_n = s_z \cos \theta$ можно было бы написать и без вычислений, основываясь на результате задачи 3.14.

Обозначим $w(+)$ вероятность значения проекции спина $s_n = 1/2$, $w(-) = 1 - w(+)$ — вероятность значения $s_n = -1/2$. Учитывая, что $\bar{s}_n = s_z \cos \theta$, находим

$$\bar{s}_n = w(+)\frac{1}{2} + w(-)\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} [2w(+)-1] = s_z \cos \theta,$$

$$w(+)=\frac{1+2s_z \cos \theta}{2}, \quad w(-)=\frac{1-2s_z \cos \theta}{2}.$$

В частности, при $s_z = +1/2$ имеем $w(+)=\cos^2(\theta/2)$, $w(-)=\sin^2(\theta/2)$.

5.3. Оператор имеет два с. з., равные $f_{1,2} = a \pm b$.

5.4. Так как проекция спина на любую ось принимает лишь два значения, равные $\pm 1/2$, то квадрат проекции спина (на любую ось) в произвольном состоянии *всегда* имеет определенное значение $1/4$.

5.5. Из эрмитовости оператора — матрицы $L = L^+$ следует $\hat{L} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}$, где a, c — вещественные числа. Эта матрица L , как и всякий эрмитов оператор, унитарным преобразованием может быть приведена к диагональному виду $\hat{L}' = \begin{pmatrix} l_1 & 0 \\ 0 & l_2 \end{pmatrix}$, где вещественные числа $l_{1,2}$ — с. з. соответствующей матрицы (оператора) L . Инвариантность следа и детерминанта матрицы относительно унитарных преобразований (см. 1.62) приводит к соотношениям

$$\text{Sp } \hat{L} = a + c = l_1 + l_2, \quad \det \hat{L} = ac - |b|^2 = l_1 l_2,$$

из которых находим искомые с. з.

$$l_{1,2} = \frac{a+c}{2} \pm \sqrt{\frac{(a-c)^2}{4} + |b|^2}.$$

5.6. Полная система квадратных матриц 2-го ранга состоит из четырех независимых матриц. Независимость четырех матриц $\hat{I}, \hat{\sigma}_i$ представляется очевидной (см. также замечание в конце решения задачи).

Взяв шпур от обеих частей рассматриваемого соотношения

$$\hat{A} = a_0 \hat{I} + \mathbf{a} \hat{\sigma} = a_0 \hat{I} + a_i \hat{\sigma}_i \quad (1)$$

и учитывая, что $\text{Sp } \hat{\sigma}_i = 0$, $\text{Sp } \hat{I} = 2$, находим $a_0 = 1/2 \text{Sp } \hat{A}$.

Умножив равенство (1) справа на матрицу $\hat{\sigma}_k$ и используя свойство матриц Паули $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k = \delta_{ik} \hat{I} + i \epsilon_{ikl} \hat{\sigma}_l$, находим (вычислив шпур) $a_k = 1/2 \text{Sp} (\hat{A} \hat{\sigma}_k) = 1/2 \text{Sp} (\hat{\sigma}_k \hat{A})$.

Отметим, что установленные значения величин a_0, a_i доказывают независимость матриц $\hat{I}, \hat{\sigma}_i$, так как при $\hat{A} = 0$ в равенстве (1) имеем $a_0 = 0, a_i = 0$.

$$5.7. |\hat{\sigma}_z| = \sqrt{\hat{\sigma}_z^2} = \hat{I}, \quad |\hat{\sigma}| = \sqrt{\hat{\sigma}^2} = \sqrt{3} \hat{I}.$$

Так как $\hat{\sigma} \times \hat{\sigma} = 2i\hat{\sigma}$, как это непосредственно следует из коммутационных соотношений для матриц Паули, то $(\hat{\sigma} \cdot \hat{\sigma} \times \hat{\sigma}) = = 6i\hat{I}$.

5.8. Так как $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k = \delta_{ik} + i \epsilon_{ikl} \hat{\sigma}_l$, то $(\hat{\sigma} \mathbf{a})^2 = \hat{\sigma}_i a_i \hat{\sigma}_k a_k = a_i a_i = \mathbf{a}^2$ и

$$(\hat{\sigma} \mathbf{a})^n = \begin{cases} a^n, & n - \text{четное,} \\ a^{n-1} (\hat{\sigma} \mathbf{a}), & n - \text{нечетное.} \end{cases}$$

5.9. Так как оператор $f = a + \mathbf{b} \hat{\sigma}$ имеет два различных с. з. (см. 5.3), то вид оператора $F = F(f)$ легко находится из резуль-

тата задачи I.52:

$$\hat{F} = \frac{F(a+b) + F(a-b)}{2} + \frac{F(a+b) - F(a-b)}{2b} \mathbf{b}\hat{\sigma}. \quad (1)$$

На основании (1) имеем

$$\exp(i\mathbf{a}\hat{\sigma}) = \cos a + i \sin a \left(\hat{\sigma} \frac{\mathbf{a}}{a} \right).$$

5.10. В s_x -представлении оператор (матрица) \hat{s}_x диагонален и имеет такой же вид, как оператор \hat{s}_z в s_z -представлении: $\hat{s}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Вид операторов \hat{s}_y и \hat{s}_z в s_x -представлении не определен однозначно: имеется бесконечно много способов выбора этих операторов (все эти различные способы выбора связаны унитарным преобразованием, оставляющим диагональной матрицу \hat{s}_x). Однако при любом выборе операторов \hat{s}_y, \hat{s}_z между ними (и \hat{s}_x) должны сохраняться коммутационные соотношения для компонент момента $[\hat{s}_i, \hat{s}_k] = i\epsilon_{ikl}\hat{s}_l$.

Один из таких наборов операторов \hat{s} имеет вид

$$\hat{s}_x = \hat{\sigma}_z/2, \quad \hat{s}_y = \hat{\sigma}_x/2, \quad \hat{s}_z = \hat{\sigma}_y/2 \quad (1)$$

(он получается циклической перестановкой из стандартного представления операторов компонент спина: $\hat{s}_x = \hat{\sigma}_x/2, \hat{s}_y = \hat{\sigma}_y/2, \hat{s}_z = \hat{\sigma}_z/2$).

Приведем еще один возможный набор операторов спина в s_x -представлении: $\hat{s}_x = \hat{\sigma}_z/2, \hat{s}_y = \hat{\sigma}_y/2, \hat{s}_z = -\hat{\sigma}_x/2$.

Вид операторов компонент спина (1) может быть получен из их стандартного представления $\hat{\sigma}/2$ с помощью унитарного преобразования U : $\hat{s} = U(\hat{\sigma}/2)U^+$. Читателю предлагается самостоятельно показать, что оператор U имеет вид

$$U = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+i & 1+i \\ -1+i & 1-i \end{pmatrix}.$$

5.11.

$$\hat{s}_+ = \hat{s}_x + i\hat{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = \hat{s}_x - i\hat{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_+^2 = \hat{s}_-^2 = 0.$$

5.12. Найдем с. ф. $\Psi_{s_n=1/2} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ оператора проекции спина на ось, направление которой в пространстве определяется единичным вектором \mathbf{n} (см. 5.2). Учитывая явный вид оператора \hat{s}_n , из уравнения на с. ф. $\hat{s}_n \Psi_{s_n=1/2} = \frac{1}{2} \Psi_{s_n=1/2}$ легко находим

$$a \sin(\theta/2) = b e^{-i\varphi} \cos(\theta/2). \quad (1)$$

При $a = \cos(\theta/2)$ согласно (1) $b = e^{i\varphi} \sin(\theta/2)$ и $\Psi_{s_n=1/2}$ принимает вид, указанный в условии задачи, причем $\theta = 2\alpha, \varphi = \beta$ представляют полярный и азимутальный углы направления

вектора \mathbf{n} , проекция спина на которое имеет определенное значение $s_n = 1/2$.

Взяв $\theta = 2\alpha = \pi/2$ и $\varphi = \beta = 0$, находим с. ф. $\Psi_{s_z=1/2}$. При $\theta = \pi/2$ и $\varphi = \pi$ получаем с. ф. $\Psi_{s_z=-1/2}$ и т. д.

5.13. Проекционный оператор $\hat{P}_{s_z=1/2}$ должен обладать следующими свойствами.

1. При действии на в. ф. состояния с проекцией спина $s_z = -1/2$ на ось z он должен давать нуль. Из этого свойства вытекает $\hat{P}_{s_z=1/2} = a(1 + \hat{\sigma}_z)$ (a — произвольная постоянная).

2. При действии на в. ф. состояния с $s_z = 1/2$ он должен оставлять ее неизменной, что дает $a = 1/2$.

Таким образом,

$$\hat{P}_{s_z=\pm 1/2} = \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\sigma}_z). \quad (1)$$

Проекционные операторы (1), как и следует, являются эрмитовыми и удовлетворяют соотношению $\hat{P}_{s_z=\pm 1/2} = \hat{P}_{s_z=\pm 1/2}^2$ (см. 1.35).

$$\hat{P}_{s_n=\pm 1/2} = \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\sigma}\mathbf{n}).$$

Поддействовав оператором $\hat{P}_{s_n=1/2}$ на произвольную спиновую функцию Ψ , получаем с. ф. $\Psi_{s_n=1/2}$ оператора \hat{s}_n , отвечающую с. з. $s_n = 1/2$. Выбрав Ψ в виде $\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, имеем

$$\begin{aligned} \Psi_{s_n=1/2} &= \hat{P}_{s_n=1/2}\Psi = \frac{1 + \hat{\sigma}\mathbf{n}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos\theta \\ e^{i\varphi} \sin\theta \end{pmatrix} = \\ &= \cos \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Найденный вид спиновой функции $\Psi_{s_n=1/2}$ (ненормированной) согласуется с результатом задачи 5.12 (θ, φ — полярный и азимутальный углы направления вектора \mathbf{n}).

5.15. Преобразование спиновой функции Ψ при вращениях системы координат — преобразование спинора — аналогично преобразованию в. ф. состояния частицы с определенным значением момента l в l_z -представлении, приведенному в 3.19:

$$\Psi' = \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix} = \exp\left(i\varphi_0 \frac{\hat{\sigma}}{2}\right) \Psi = \left(\cos \frac{\varphi_0}{2} + i \sin \frac{\varphi_0}{2} \hat{\sigma}\mathbf{n}_0\right) \Psi. \quad (1)$$

Из (1) следует закон преобразования спиновой функции $\Phi^* = |\varphi_1^*, \varphi_2^*|$:

$$\Phi'^* = \Phi^* \left(\cos \frac{\varphi_0}{2} - i \sin \frac{\varphi_0}{2} \hat{\sigma}\mathbf{n}_0\right). \quad (2)$$

Учитывая (1) и (2), легко находим, что $\Phi'^*\Psi' = \Phi^*\Psi$.

5.16. Используя соотношения (1) и (2) предыдущей задачи и формулу $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k = \delta_{ik} + i \varepsilon_{ikl} \hat{\sigma}_l$, после простых преобразований находим

$$\mathbf{V}' = \Phi^* \hat{\sigma} \Psi' = \cos \varphi_0 \cdot \mathbf{V} - \sin \varphi_0 \cdot [\mathbf{n}_0 \mathbf{V}] + 2 \sin^2 \frac{\varphi_0}{2} \cdot \mathbf{n}_0 (\mathbf{n}_0 \mathbf{V}), \quad (1)$$

что представляет закон преобразования вектора при указанном в условии предыдущей задачи вращении системы координат. В частности, при $\mathbf{n}_0 = (0, 0, 1)$ (поворот системы координат относительно оси z) из (1) следует

$$\begin{aligned} V'_x &= \cos \varphi_0 \cdot V_x + \sin \varphi_0 \cdot V_y, & V'_y &= -\sin \varphi_0 \cdot V_x + \cos \varphi_0 \cdot V_y, \\ V'_z &= V_z. \end{aligned}$$

5.17. Вид спиновых функций $\Psi_{11} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2$ и $\Psi_{1,-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2$ очевиден.

Из условия $\hat{\mathbf{S}}^2 \Psi_{00} = 0$ следует

$$(\Psi_{00}^* \hat{\mathbf{S}}^2 \Psi_{00}) = \|\hat{\mathbf{S}} \Psi_{00}\|^2 = \|\hat{S}_x \Psi_{00}\|^2 + \|\hat{S}_y \Psi_{00}\|^2 + \|\hat{S}_z \Psi_{00}\|^2 = 0,$$

так что

$$\hat{S}_x \Psi_{00} = 0$$

или

$$\begin{aligned} \hat{S}_x \Psi_{00} &= \frac{1}{2} [\hat{\sigma}_{x1} + \hat{\sigma}_{x2}] \left\{ C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} = \\ &= (C_1 + C_2) \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \right\} = 0, \end{aligned}$$

что дает $C_1 = -C_2$ в случае функции Ψ_{00} . Так как функции Ψ_{10} и Ψ_{00} ортогональны, то $C_1 = C_2$ для функции Ψ_{10} .

Таким образом, нормированные с. ф. Ψ_{10} и Ψ_{00} имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}, \\ \Psi_{00} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}. \end{aligned}$$

Найденные функции Ψ_{SS_z} имеют определенную симметрию по отношению к перестановке спиновых переменных обеих частиц (они симметричны при $S = 1$ и антисимметричны при $S = 0$) в соответствии с результатом задачи 3.39.

5.18. Так как $\hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{1}{4} (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)^2$ и $\hat{\sigma}^2 = 3$, то $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 = -3 + 2\hat{\mathbf{S}}^2$ и с. ф. оператора $\hat{\mathbf{S}}^2$ являются также с. ф. и оператора $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$, отвечающими с. з. -3 (при $S = 0$) и $+1$ (при $S = 1$).

Отметим, что если усреднить значения оператора $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$ по четырем независимым состояниям с определенными значениями S

и S_z , считая их равновероятными, то среднее значение оказывается равным нулю.

5.19. Представим спиновую функцию в виде

$$\Psi_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} [\varphi_\alpha \chi_\beta + \chi_\alpha \varphi_\beta] + \frac{1}{2} [\varphi_\alpha \chi_\beta - \chi_\alpha \varphi_\beta]. \quad (1)$$

Учитывая результат задачи 5.17 о симметрии спиновых функций Ψ_{SS_z} по отношению к перестановке местами спиновых переменных обеих частиц, замечаем, что первое слагаемое в правой части выражения (1) отвечает значению $S = 1$ суммарного спина, а второе — значению $S = 0$.

Так как исходная функция $\Psi_{\alpha\beta}$ нормирована на единицу, то нормировка каждого из двух слагаемых в выражении (1) определяет вероятность соответствующего значения суммарного спина. Таким образом, имеем

$$w(S=0, 1) = \frac{1}{4} (\varphi_\alpha^* \chi_\beta^* \mp \chi_\alpha^* \varphi_\beta^*) (\varphi_\alpha \chi_\beta \mp \chi_\alpha \varphi_\beta) = \frac{1}{2} (1 \mp |\varphi_\alpha^* \chi_\alpha|^2),$$

где знак «+» относится к $S = 1$, знак «-» — к $S = 0$; $\bar{S}^2 = 2w(S=1)$.

5.20. Так как эрмитов оператор $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$ имеет только два различных с.з., равных -3 и $+1$ (см. 5.18), то имеет место соотношение $(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 - 1)(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 + 3) = 0$ или $(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)^2 = 3 - 2\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$ (сравнить с 1.27).

5.21. На основании результатов задач 1.52 и 5.18 легко находим

$$\hat{F} = \frac{3F(a+b) + F(a-3b)}{4} + \frac{F(a+b) - F(a-3b)}{4} \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2.$$

5.22. Вид проекционных операторов легко найти, если учесть, что с.ф. оператора \hat{S}^2 являются также с.ф. оператора $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$:

$$\hat{P}_{S=0} = \frac{1 - \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2}{4}, \quad \hat{P}_{S=1} = \frac{3 + \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2}{4}.$$

5.23. Представим произвольную спиновую функцию в виде

$$\Psi_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} [\Psi_{\alpha\beta} + \Psi_{\beta\alpha}] + \frac{1}{2} [\Psi_{\alpha\beta} - \Psi_{\beta\alpha}], \quad (1)$$

где первое и второе слагаемые в правой части являются спиновыми функциями, описывающими состояния с определенным значением суммарного спина $S = 1$ и $S = 0$ соответственно, что следует из характера симметрии этих функций по отношению к перестановке спиновых переменных обеих частиц. По смыслу проекционных операторов $\hat{P}_{S=0, 1}$ имеем

$$\hat{P}_{S=1} \Psi_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} [\Psi_{\alpha\beta} + \Psi_{\beta\alpha}], \quad \hat{P}_{S=0} \Psi_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} [\Psi_{\alpha\beta} - \Psi_{\beta\alpha}]. \quad (2)$$

Согласно определению оператора \hat{C}

$$\hat{C}\Psi_{\alpha\beta} = \Psi_{\beta\alpha} = \frac{1}{2}[\Psi_{\alpha\beta} + \Psi_{\beta\alpha}] - \frac{1}{2}[\Psi_{\alpha\beta} - \Psi_{\beta\alpha}], \quad (3)$$

и из (2), (3) с учетом явного вида проекционных операторов, установленного в предыдущей задаче, имеем

$$\hat{C} = \hat{P}_{S=1} - \hat{P}_{S=0} = \frac{1 + \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2}{2}. \quad (4)$$

Отметим следующие свойства оператора \hat{C} . Он — эрмитов оператор. Его с. ф. — спиновые функции, отвечающие определенному значению суммарного спина S , а соответствующие с. з. равны $+1$ при $S=1$ и -1 при $S=0$. Очевидно, что $\hat{C}^2 = 1$.

5.24. Легко сообразить, что проекционные операторы на состояния с определенной проекцией суммарного спина на ось z , равной ± 1 , имеют вид

$$\hat{P}_{S_z=1} = \frac{\hat{S}_z(\hat{S}_z + 1)}{2}, \quad \hat{P}_{S_z=-1} = \frac{\hat{S}_z(\hat{S}_z - 1)}{2} \quad \left(\hat{S}_z = \frac{\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}}{2} \right).$$

Далее, очевидно:

$$\hat{P}_{S=1, S_z=1} = \hat{P}_{S_z=1}, \quad \hat{P}_{1, -1} = \hat{P}_{S_z=-1},$$

$$\hat{P}_{00} = \hat{P}_{S=0} = \frac{1}{4}(1 - \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2) \quad (\text{см. 5.22}).$$

Из соотношения $\sum_{SS_z} \hat{P}_{SS_z} = \hat{P}_{00} + \hat{P}_{10} + \hat{P}_{11} + \hat{P}_{1, -1} = 1$ находим вид оператора:

$$\hat{P}_{10} = \frac{1 - 2\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z} + \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2}{4}.$$

5.25. а) Спиновые функции Ψ_{SS_z} являются с. ф. оператора \hat{V}_1 , и им соответствуют с. з. этого оператора, равные

$$(V_1)_{SS_z} = 2aS_z - 3b + 2bS(S+1)$$

(так как $\hat{S}_z = (\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z})/2$ и $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 = -3 + 2\hat{S}^2$).

б) Найдем вид оператора

$$\hat{V}_2 = \frac{a_1 + a_2}{2}(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}) + \frac{a_1 - a_2}{2}(\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}) + b\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$$

в SS_z -представлении. В этом представлении он является матрицей с элементами, равными

$$(V_2)_{SS_z}^{S'S'_z} \equiv (\Psi_{S'S'_z}^* \hat{V}_2 \Psi_{SS_z}). \quad (1)$$

Используя в матричных элементах следующую нумерацию состояний, определяемых квантовыми числами SS_z :

$$S=1, S_z=1 \rightarrow 1; \quad 1, -1 \rightarrow 2; \quad 1, 0 \rightarrow 3; \quad 0, 0 \rightarrow 4,$$

и учитывая явный вид спиновых функций Ψ_{SS_2} , найденных в 5.17, находим матрицу (1):

$$\hat{V}_2 = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & E \\ 0 & 0 & E^* & D \end{pmatrix}; \quad \begin{aligned} A &= a_1 + a_2 + b, \\ B &= -a_1 - a_2 + b, \\ C &= b, \quad E = E^* = a_1 - a_2, \\ D &= -3b. \end{aligned}$$

Унитарным преобразованием эта эрмитова матрица может быть приведена к диагональному виду, непосредственно определяющему ее с.з. Из вида матрицы \hat{V}_2 легко заключить, что два ее с.з. равны A и B и им отвечают с.ф., равные $\Psi_{S=1, S_2=1}$ и $\Psi_{1, -1}$ соответственно. Унитарный оператор (матрица), диагонализующий матрицу \hat{V}_2 , в SS_2 -представлении «перемешивает» лишь состояния с квантовыми числами $1,0$ и $0,0$, и задача отыскания двух других с.з. матрицы сводится к диагонализации двухрядной матрицы вида $\begin{pmatrix} C & E \\ E^* & D \end{pmatrix}$.

Учитывая сказанное выше и результат задачи 5.5, находим с.з. оператора \hat{V}_2 :

$$\begin{aligned} (V_2)_1 &= A = a_1 + a_2 + b, & (V_2)_2 &= B = -a_1 - a_2 + b, \\ (V_2)_{3,4} &= -b \pm \sqrt{(a_1 - a_2)^2 + 4b^2}. \end{aligned}$$

Читателю предлагается самостоятельно найти с.ф., отвечающие с.з. $(V_2)_{3,4}$.

5.26. В указанном состоянии суммарный спин любых n частиц имеет определенное значение, равное $S(n) = ns$.

5.27. Учитывая, что

$$\hat{S}^2 = \frac{1}{4} \left(\sum_{a=1}^N \hat{\sigma}_a \right)^2 = \frac{1}{4} \left(\sum_a \hat{\sigma}_a^2 + \sum_{a \neq b} \hat{\sigma}_a \hat{\sigma}_b \right),$$

$\hat{\sigma}_a^2 = 3$ и что в рассматриваемом состоянии между спинами отдельных частиц нет корреляции и средние значения $\underline{\sigma}_a$ равны

$$\overline{(\hat{\sigma}_a)_i} = \begin{cases} 0, & i = 1, 2, \\ 1, & i = 3, \quad a \leq n, \\ -1, & i = 3, \quad a \geq n + 1, \end{cases}$$

легко находим

$$\overline{\hat{S}^2} = \frac{1}{4} \{N^2 - 4nN + 2N + 4n^2\}. \quad (1)$$

Отметим, что значение (1) можно было бы написать и без всяких вычислений, на основании результата задачи 3.37, если формально рассматривать систему из N частиц как состоящую

из двух подсистем, одна из которых объединяет первые n частиц и имеет спин $S_1 = n/2$, $S_{1z} = n/2$, а вторая содержит остальные частицы и характеризуется квантовыми числами $S_2 = (N - n)/2$, $S_{2z} = -(N - n)/2$.

5.28. Суммарный спин может принимать лишь два значения: $S = N/2$ и $S = (N - 2)/2$ ($N \geq 2$), вероятности которых легко найти, учитывая значение \widehat{S}^2 в рассматриваемом состоянии:

$$w\left(S = \frac{N}{2}\right) = \frac{1}{N}, \quad w\left(S = \frac{N-2}{2}\right) = \frac{N-1}{N}.$$

5.29. Вероятности двух возможных значений полного момента частицы $j = l \pm 1/2$ равны (сравнить с 3.38)

$$w(j = l + 1/2) = \frac{l + 2ms_z + 1}{2l + 1}, \quad w(j = l - 1/2) = \frac{l - 2ms_z}{2l + 1}.$$

5.30. Рассмотрим систему, состоящую из $N = 2J$ частиц со спином $s = 1/2$, причем все частицы имеют определенную проекцию спина $s_z = +1/2$ на ось z , т. е. состояние характеризуется значениями $S = J$, $S_z = J$ полного спина системы.

Согласно 5.2 в состоянии отдельной частицы с $s_z = 1/2$ вероятности значений проекции спина $\pm 1/2$ на ось, направленную вдоль вектора \mathbf{n} , равны $w(s_n = +1/2) = \cos^2(\theta/2)$ и $w(s_n = -1/2) = \sin^2(\theta/2)$, где θ — угол между осями \mathbf{n} и z . Выберем $m = J + J_n$ частиц (из общего числа $2J$) и найдем вероятность того, что для этих частиц $s_n = +1/2$, а для остальных $s_n = -1/2$:

$$w = [\cos^2(\theta/2)]^{J+J_n} [\sin^2(\theta/2)]^{J-J_n}. \quad (1)$$

Если величину (1) умножить на общее число способов, которыми можно выбрать такие m частиц из общего числа $2J$:

$$W(J_n) = C_{2J}^{J+J_n} [\cos^2(\theta/2)]^{J+J_n} [\sin^2(\theta/2)]^{J-J_n}, \quad (2)$$

то получим вероятность $W(J_n)$ того, что в рассматриваемом состоянии проекция суммарного спина на направление вектора \mathbf{n} равна J_n ($J_n = (J + J_n) 1/2 + (J - J_n) (-1/2)$).

Формула (2) решает поставленную задачу, так как искомая вероятность не зависит от «природы» момента (орбитальный или спиновый, «элементарный» или составной и т. п.).

Отметим, что переход от формулы (1) к (2) может показаться некорректным с точки зрения квантовой механики, так как при этом, грубо говоря, произведено сложение вероятностей (а не амплитуд!). Разъяснение этого кажущегося противоречия состоит в том, что указанные амплитуды ортогональны (из-за ортогональности спиновых функций $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$) и не интерферируют друг с другом.

5.31. В. ф. состояния с $J = 3/2$, $J_z = 3/2$ в $j_{1z}j_{2z}$ -представлении, очевидно, имеет вид $\Psi_{3/2, 3/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2$. Подействовав на эту функцию оператором $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$, находим функцию $\Psi_{3/2, 1/2}$:

$$\begin{aligned} \Psi_{3/2, 1/2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \left\{ \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \end{aligned} \quad (1)$$

(вид операторов $\hat{j}_{1,2-}$ приведен в 3.26 и 5.11, множитель $1/\sqrt{3}$ в выражении (1) введен для нормировки).

Из (1) следуют значения вероятностей проекций складываемых моментов на ось z в состоянии с $J = 3/2$, $J_z = 1/2$:

$$\omega(j_{1z} = 1) = \omega(j_{2z} = -\frac{1}{2}) = \frac{1}{3}, \quad \omega(j_{1z} = 0) = \omega(j_{2z} = \frac{1}{2}) = \frac{2}{3}.$$

Представив в. ф. состояния с $J = 1/2$, $J_z = 1/2$ в виде

$$\Psi_{1/2, 1/2} = C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

и учитывая ортогональность этой функции к $\Psi_{3/2, 1/2}$, находим значения $C_1 = -\sqrt{2} C_2 = \sqrt{2/3}$ (с учетом нормировки), а с ними и вероятности проекций складываемых моментов в состоянии с $J = 1/2$, $J_z = 1/2$:

$$\omega(j_{1z} = 1) = \omega(j_{2z} = -1/2) = 2/3, \quad \omega(j_{1z} = 0) = \omega(j_{2z} = 1/2) = 1/3.$$

Аналогично можно рассмотреть и другие состояния, указанные в условии задачи.

5.32. В состоянии с максимально возможным значением спина $S = N/2$ спин любых двух частиц равен 1 и спиновая функция симметрична по отношению к перестановке спиновых переменных этих (а значит, и любых других) частиц (см., например, 5.17).

Для состояний с $S < N/2$ при $N > 2$ спиновая функция, вообще говоря, не имеет определенной симметрии по отношению к перестановке спиновых переменных любых двух частиц (см. 5.33).

5.33. Возможные значения суммарного спина: $S = 3/2, 1/2$.

Спиновые состояния с определенными значениями S и S_z при $S = 1/2$ являются двукратно вырожденными, так как суммарный спин $S = 1/2$ может быть получен двумя независимыми способами: 1) путем сложения спинов первых двух частиц в их

результующий спин $S_{12} = 0$; 2) путем сложения результующего спина $S_{12} = 1$ первых двух частиц со спином третьей в суммарный спин $S = 1/2$.

Так как число независимых спиновых состояний при данном значении S равно $2S + 1$ (в отсутствие вырождения по S), то общее число различных спиновых состояний равно $(2 \cdot \frac{3}{2} + 1) + 2(2 \cdot \frac{1}{2} + 1) = 8$, как и следует.

Вид спиновых функций $\Psi_{S=3/2, S_z=\pm 3/2}$ очевиден:

$$\Psi_{3/2, 3/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3, \quad \Psi_{3/2, -3/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3.$$

Спиновые функции состояний с $S = 3/2$, $S_z = \pm 1/2$ легко найти, если учесть свойство симметрии функций по отношению к перестановке спиновых переменных частиц (см. предыдущую задачу):

$$\begin{aligned} \Psi_{3/2, 1/2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 + \right. \\ &\quad \left. + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 \right\}, \\ \Psi_{3/2, -1/2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 + \right. \\ &\quad \left. + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 \right\}. \end{aligned}$$

Если спиновая функция отвечает результующему спину первых двух частиц, равному $S_{12} = 0$, то она, очевидно, описывает состояние с $S = 1/2$. Поэтому

$$\begin{aligned} \Psi_{1/2, 1/2}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3, \\ \Psi_{1/2, -1/2}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3. \end{aligned} \quad (1)$$

Как отмечалось выше, спиновые состояния с $S = 1/2$, $S_z = \pm 1/2$ являются двукратно вырожденными. Вторую пару функций $\Psi_{1/2, \pm 1/2}^{(2)}$, линейно независимых по отношению к функциям (1), легко найти, рассмотрев состояния с результующим спином $S_{23} = 0$ второй и третьей частиц:

$$\begin{aligned} \Psi_{1/2, 1/2}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 \right\}, \\ \Psi_{1/2, -1/2}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_3 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

Отметим, что, хотя функции (1) и (2) линейно независимы, они не являются ортогональными (при одинаковых значениях

S_z). Наиболее общая спиновая функция состояния с $S = 1/2$ представляет суперпозицию функций (1), (2). Читателю предлагается самостоятельно рассмотреть состояния с результирующим моментом $S_{13} = 0$ и выразить спиновые функции таких состояний через функции (1), (2).

5.34. Возможные значения суммарного спина: $S = 0, 1, 2$. Спиновые состояния с определенными значениями S, S_z имеют следующие кратности вырождения: $g_0 = 2$ при $S = 0, g_1 = 3$ при $S = 1, g_2 = 1$ (вырождение отсутствует) при $S = 2$.

Таким образом, общее число состояний равно $G = \sum_{i=0}^2 g_i(2S_i + 1) = 16$, как и следует. (Сравнить с решением 3.48.)

5.35. а) Так как состояние системы с полным моментом $J = 0$ является сферически симметричным — в.ф. не изменяется при вращении системы координат вокруг любой оси, проходящей через точку, по отношению к которой момент имеет определенное значение $J = 0$, — то среднее значение любого мультипольного момента равно нулю ($\bar{\mathbf{d}} = 0, \bar{\boldsymbol{\mu}} = 0, \bar{D}_{ik} = 0$ и т. д.).

б) Рассмотрим матричные элементы вида

$$\langle n, J = 1/2, J'_z | \hat{M}_{\{i\}} | n, J = 1/2, J_z \rangle, \quad (1)$$

где n означает совокупность квантовых чисел, которые вместе с J и J_z образуют полный набор, а $\hat{M}_{\{i\}}$ — символическое представление оператора произвольного мультипольного момента (так, $\hat{M}_{\{i\}} \equiv \hat{d}_i = \sum_a e_a x_{ai}$ для дипольного, $\hat{M}_{\{i\}} \equiv \hat{D}_{ik} = \sum_a e_a (3x_{ai}x_{ak} - r_a^2 \delta_{ik})$ для квадрупольного момента и т. д.).

После выполнения в выражении (1) интегрирования по координатам частиц (включая и суммирование по спинам отдельных частиц) его можно представить в виде

$$\langle J'_z | \tilde{M}_{\{i\}} | J_z \rangle, \quad (2)$$

где $\tilde{M}_{\{i\}}$ являются матрицами, действующими в пространстве спиновых переменных спина $1/2$ (так как $J = 1/2$).

Рассмотрим возможный вид матриц $\tilde{M}_{\{i\}}$.

В случае квадрупольного момента D_{ik} из одних лишь соображений тензорной структуры рассматриваемого выражения можно написать следующее соотношение:

$$(D_{ik})_{J'_z J_z} = \langle J'_z | A \delta_{ik} + B e_{ikl} \tilde{\sigma}_l | J_z \rangle,$$

но условие симметрии (по индексам i и k) требует $B = 0$, а равенство нулю следа, $D_{ii} = 0$, дает $A = 0$, т. е. матричные элементы тензора квадрупольного момента (в том числе и его средние значения) в случае момента $J = 1/2$ системы тождественно равны нулю.

Для дипольного магнитного момента системы можно написать

$$(\mu_i)_{J'_z J_z} = a \langle J'_z | \hat{\sigma}_i | J_z \rangle, \quad (3)$$

и нет никаких оснований считать, что $a = 0$, т. е. среднее значение $\overline{\mu_i}$, вообще говоря, отлично от нуля.

В случае дипольного электрического момента можно записать, аналогично (3),

$$(d_i)_{J'_z J_z} = b \langle J'_z | \hat{\sigma}_i | J_z \rangle.$$

Так как вектор дипольного момента \mathbf{d} — полярный (истинный) вектор, а матричные элементы оператора спина являются компонентами аксиального (псевдо-) вектора, то величина b должна быть псевдоскаляром (если b — истинный скаляр, то с необходимостью $b = 0$). Для того чтобы $b \neq 0$, необходимо, чтобы рассматриваемая система не имела определенной четности, в противном случае (см. 1.21) $\overline{\mathbf{d}} = 0$, $b = 0$.

5.36. Указанные функции легко найти, имея в виду результат задачи 5.12:

$$\Psi_{p_0, \lambda=1/2} = \frac{e^{i p_0 r / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} \cos(\tilde{\theta}/2) \\ \sin(\tilde{\theta}/2) e^{i\tilde{\phi}} \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{p_0, \lambda=-1/2} = \frac{e^{i p_0 r / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} \sin(\tilde{\theta}/2) \\ -\cos(\tilde{\theta}/2) e^{i\tilde{\phi}} \end{pmatrix},$$

где $\tilde{\theta}$, $\tilde{\phi}$ — полярный и азимутальный углы, определяющие направление вектора \mathbf{p}_0 .

5.37. Так как в импульсном представлении оператор импульса является оператором умножения, то в этом представлении имеем $\hat{\lambda} = (\hat{\mathbf{s}}\mathbf{n})$, где $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$. Коммутативность операторов $\{\hat{j}_i, \hat{\lambda}\} = 0$ можно проверить непосредственным вычислением, однако она представляется очевидной и без вычислений как выражение общего свойства — коммутативности оператора полного момента системы с оператором произвольной скалярной (или псевдоскалярной) величины, относящейся к данной системе. Отметим, что оператор спиральности можно записать также в виде $\hat{\lambda} = (\hat{\mathbf{j}}\mathbf{n})$, так как $\hat{\mathbf{l}}\mathbf{n} = 0$.

5.38. Подействуем на указанную функцию оператором $\hat{\mathbf{j}}^2$:

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \Psi = \left(\hat{\mathbf{l}} + \frac{\hat{\sigma}}{2} \right)^2 (\hat{\sigma}\mathbf{n}) \chi. \quad (1)$$

Учитывая соотношения $[\hat{j}_i, (\hat{\sigma}\mathbf{n})] = 0$, $\hat{\mathbf{l}}\chi = 0$, выражение (1) можно представить в виде

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \Psi = (\hat{\sigma}\mathbf{n}) (1/2\hat{\sigma})^2 \chi = 3/4 (\hat{\sigma}\mathbf{n}) \chi = 3/4 \Psi, \quad (2)$$

Из которого следует непосредственно, что функция Ψ отвечает состоянию со значением $j = 1/2$ полного момента.

То обстоятельство, что указанная функция отвечает состоянию со значением $l = 1$ орбитального момента, очевидно на основании результата задачи 3.57.

Так как $\Psi^*\Psi = \chi^*(\hat{\sigma}\mathbf{n})^2\chi = \chi^*\chi = \text{const}$ (не зависит от \mathbf{n}), то распределение по направлениям импульса частицы является изотропным, как и в случае $s_{1/2}$ -состояния, а условие нормировки

$$\int \Psi^*\Psi d\Omega = 4\pi\chi^*\chi = 1, \quad \chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

будет выполнено при $\chi^*\chi = |a|^2 + |b|^2 = 1/4\pi$.

Из соотношения

$$\Psi^*\hat{j}\Psi = \chi^*(\hat{\sigma}\mathbf{n})\left(\hat{1} + \frac{1}{2}\hat{\sigma}\right)(\hat{\sigma}\mathbf{n})\chi = \chi^*\frac{\hat{\sigma}}{2}\chi$$

следует, что свойства момента в рассматриваемом состоянии точно такие же, как у вектора спина в состоянии, описываемом спиновой функцией χ . Поэтому, выбрав $\chi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, получим функцию Ψ , описывающую $p_{1/2}$ -состояние частицы с определенной проекцией $j_z = 1/2$ полного момента на ось z .

5.39. Учитывая результат предыдущей задачи, заключаем, что приведенные функции описывают состояния частицы с определенным значением $j = 1/2$ полного момента. Орбитальный момент l частицы в указанных состояниях не имеет определенного значения и с одинаковой вероятностью, равной $1/2$, может принимать два значения: $l = 0, 1$. Поэтому в рассматриваемых состояниях четность частицы также не имеет определенного значения.

Приведенные функции описывают состояния частицы с определенной спиральностью λ (см. 5.37):

$$\hat{\lambda}\Psi_{\pm} = 1/2(\hat{\sigma}\mathbf{n})(1 \pm \hat{\sigma}\mathbf{n})\chi = 1/2(\hat{\sigma}\mathbf{n} \pm 1)\chi = \pm 1/2\Psi_{\pm}.$$

5.40. Наиболее общий вид спин-угловой зависимости в. ф. состояний частицы со спином $s = 1/2$, отвечающих моменту $l = 1$, следующий:

$$\Psi = (\mathbf{c}\mathbf{n})\chi, \quad (1)$$

где \mathbf{c} — произвольный вектор, $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ — произвольный спинор (\mathbf{c} и χ не зависят от вектора \mathbf{n}).

Функция вида (1) не отвечает, вообще говоря, определенному значению j полного момента и представляет суперпози-

цию состояний с $j = 1/2$ и $j = 3/2$. Чтобы выделить из этой функции часть, отвечающую состоянию с $j = 3/2$, подействуем на функцию (1) проекционным оператором $\hat{P}_{j=3/2}$. Вид этого оператора

$$\hat{P}_{j=3/2} = 1/3 (2 + \hat{1}\hat{\sigma})$$

следует из результата задачи 3.49. Легко находим

$$\Psi_{j=3/2} = \hat{P}_{j=3/2} \Psi = 1/3 \{2(\mathbf{cn}) + i[\mathbf{cn}]\hat{\sigma}\} \chi \quad (2)$$

в согласии с условием задачи.

Читателю предлагается самостоятельно нормировать функцию вида (2) и убедиться в ортогональности ее к в. ф. $p_{1/2}$ -состояния, обсуждавшейся в 5.38.

Отметим, что общее число независимых функций вида (1) равно шести (три независимых способа выбора компонент вектора \mathbf{s} и два — спинора χ). Независимых же функций вида (2), как и следует, только четыре.

Функция (1) при выборе $\mathbf{s} = (0, 0, 1)$ и $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ описывает состояние частицы с $l_z = 0$ (см., например, 3.22) и $s_z = 1/2$, а, следовательно, и с определенным значением $j_z = 1/2$ (при этом полный момент j не имеет определенного значения!). Функция (2) при указанном выборе \mathbf{s} и χ имеет вид

$$\Psi_{j=3/2, l_z=1/2} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 \cos \theta \\ -\sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

и описывает состояние частицы с $j = 3/2$ и $j_z = 1/2$ (проекционный оператор \hat{P}_j коммутирует, очевидно, с \hat{j}_z , и если функция (1) является с. ф. \hat{j}_z , то функция (2) также является с. ф. \hat{j}_z , отвечающей тому же с. з. j_z).

Аналогично можно найти явный вид в. ф. $p_{3/2}$ -состояний частицы с другими значениями j_z .

5.41. а) Рассмотрим в. ф. вида

$$\Psi = \begin{pmatrix} Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

отвечающую состоянию частицы с определенными значениями l и $j_z = m + 1/2$. Эта функция не является, вообще говоря, с. ф. оператора \hat{j}^2 , а представляет суперпозицию состояний с $j = l + 1/2$ и $j = l - 1/2$.

Подействовав на в. ф. (1) проекционным оператором $P(j = l + 1/2)$ на состояния с заданным значением $j = l + 1/2$, вид которого

$$\hat{P}(j = l + 1/2) = \frac{l + 1 + \hat{1}\hat{\sigma}}{2l + 1}$$

следует из результата задачи 3.49, и учитывая соотношения

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{I}}\sigma &\equiv 2\widehat{\mathbf{I}}\widehat{\mathbf{s}} = 2\widehat{l}_z\widehat{s}_z + \widehat{l}_+\widehat{s}_- + \widehat{l}_-\widehat{s}_+, \\ \widehat{j}_+\Psi_{ll_z} &= \sqrt{(j-j_z)(j+j_z+1)}\Psi_{l, l_z+1}, \\ \widehat{j}_-\Psi_{ll_z} &= \sqrt{(j+j_z)(j-j_z+1)}\Psi_{l, l_z-1},\end{aligned}\quad (2)$$

легко находим явный вид искомых функций:

$$\begin{aligned}\Psi_{j=l+1/2, l, l_z=m+1/2} &= C\widehat{P}(j=l+1/2)\Psi = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1}Y_{lm} \\ \sqrt{l-m}Y_{l, m+1} \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (3)$$

где коэффициент C выбран из условия нормировки спин-угловой в. ф. на единицу.

б) Вид в. ф. состояния с определенными значениями квантовых чисел $l, j=l+1/2, j_z=l+1/2$ очевиден:

$$\Psi_{l+1/2, l+1/2} = \begin{pmatrix} Y_{ll}(\theta, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Поддействовав на эту функцию оператором \widehat{j}_-^n где $n=l+1/2-j_z$, получим функцию $\Psi_{l+1/2, l, l_z}$. Учитывая, что $\widehat{j}_- = \widehat{l}_- + \widehat{s}_-, \widehat{s}_-^2 = 0$ и поэтому

$$\widehat{j}_-^n = (\widehat{l}_- + \widehat{s}_-)^n = \widehat{l}_-^n + n\widehat{l}_-^{n-1}\widehat{s}_-,$$

а также соотношения (2), приходим к уже известному виду (3) функций:

$$\Psi_{l+1/2, l, m+1/2} = \widetilde{C}\widehat{j}_-^{l-m} \begin{pmatrix} Y_{ll} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1}Y_{lm} \\ \sqrt{l-m}Y_{l, m+1} \end{pmatrix}.$$

$$5.42. \widehat{P}(j=l-1/2) = \frac{l-\widehat{\sigma}_l}{2l+1},$$

$$\Psi_{j=l-1/2, l, l_z=m+1/2} =$$

$$= C\widehat{P}(j=l-1/2) \begin{pmatrix} Y_{lm} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l-m}Y_{lm} \\ -\sqrt{l+m+1}Y_{l, m+1} \end{pmatrix}.$$

5.43. Утверждение задачи можно проверить непосредственным вычислением, но проще его подтвердить следующим рассуждением, основанным на коммутативности операторов \widehat{j}_i и $(\widehat{\sigma}\mathbf{n})$ ($[\widehat{j}_i, (\widehat{\sigma}\mathbf{n})] = 0$) и псевдоскалярном характере оператора $(\widehat{\sigma}\mathbf{n})$.

Пусть $\Psi_{l_1 l_2 l_z}$ — с. ф. операторов $\widehat{j}^2, \widehat{I}^2, \widehat{j}_z$, причем $l_2 = j - 1/2$. Эта функция имеет определенную четность, равную $l_2 = (-1)^{l_2}$.

Рассмотрим функцию $\tilde{\Psi} = (\hat{\sigma}\mathbf{n}) \Psi_{j_1 l_2 j_z}$. Легко находим

$$\begin{aligned}\hat{j}_z \tilde{\Psi} &= \hat{j}_z (\hat{\sigma}\mathbf{n}) \Psi_{j_1 l_2 j_z} = (\hat{\sigma}\mathbf{n}) \hat{j}_z \Psi_{j_1 l_2 j_z} = j_z (\hat{\sigma}\mathbf{n}) \Psi_{j_1 l_2 j_z} = j_z \tilde{\Psi}, \\ \hat{j}^2 \tilde{\Psi} &= \hat{j}^2 (\hat{\sigma}\mathbf{n}) \Psi_{j_1 l_2 j_z} = (\hat{\sigma}\mathbf{n}) \hat{j}^2 \Psi_{j_1 l_2 j_z} = j(j+1) \tilde{\Psi}, \\ \hat{I} \tilde{\Psi} &= \hat{I} (\hat{\sigma}\mathbf{n}) \Psi_{j_1 l_2 j_z} = -(\hat{\sigma}\mathbf{n}) \hat{I} \Psi_{j_1 l_2 j_z} = (-1)^{l_2+1} \tilde{\Psi}.\end{aligned}\quad (1)$$

Из выражений (1) следует, что функция $\tilde{\Psi}$ является с. ф. операторов \hat{j}^2 , \hat{j}_z , \hat{I} , причем четность этой функции противоположна четности функции $\Psi_{j_1 l_2 j_z}$. Так как при данном j возможные значения орбитального момента l равны $l_{1,2} = j \pm 1/2$, а четность состояния равна $(-1)^l$, очевидно, что если в состоянии $\Psi_{j_1 l_2 j_z}$ орбитальный момент равен l_2 , то в состоянии $\tilde{\Psi}$ он равен $l_1 = j + 1/2$. Таким образом, функция $\tilde{\Psi}$ является с. ф. операторов \hat{j}^2 , \hat{I}^2 , j_z : $\tilde{\Psi} \equiv \Psi_{j_1 l_1 j_z}$.

Отметим, что

$$\tilde{\Psi}^* \tilde{\Psi} = \Psi_{j_1 l_2 j_z}^* (\hat{\sigma}\mathbf{n})^2 \Psi_{j_1 l_2 j_z} = \Psi_{j_1 l_2 j_z}^* \Psi_{j_1 l_2 j_z},$$

откуда следует одинаковый вид функций распределения по направлениям импульса частицы в состояниях, описываемых в. ф. $\tilde{\Psi}$ и $\Psi_{j_1 l_2 j_z}$, и одинаковая нормировка этих функций.

$$5.44. \Psi_{j, l_z, \lambda = \pm 1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{1 \pm (\hat{\sigma}\mathbf{n})\} \Psi_{j l j_z}.$$

Учитывая явный вид функций $\Psi_{j l j_z}$ (см. 5.41), находим

$$\begin{aligned}\Psi_{j, l_z, \lambda = 1/2} &= \sqrt{\frac{2}{2l+1}} \left\{ \sqrt{l+m+1} \cos(\theta/2) Y_{lm} + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{l-m} \sin(\theta/2) e^{-i\varphi} Y_{l, m+1} \right\} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \\ \Psi_{j, l_z, \lambda = -1/2} &= \sqrt{\frac{2}{2l+1}} \left\{ \sqrt{l+m+1} \sin(\theta/2) Y_{lm} - \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{l-m} \cos(\theta/2) e^{-i\varphi} Y_{l, m+1} \right\} \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ -\cos(\theta/2) e^{i\varphi} \end{pmatrix},\end{aligned}$$

где $m = j_z - 1/2$.

5.45. Среднее значение магнитного момента непосредственно следует из результата задачи 3.54:

$$\begin{aligned}\bar{\mu}_x &\equiv \langle j l j_z | \hat{\mu}_x | j l j_z \rangle = \bar{\mu}_y = 0, \\ \bar{\mu}_z &= \frac{j_z}{j(j+1)} \left\{ \left[j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4} \right] \mu_0 + \right. \\ &\quad \left. + \left[j(j+1) + l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \frac{e\hbar}{4mc} \right\},\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}\bar{\mu}_z &= j_z \left[\frac{\mu_0}{j} + \frac{2j-1}{4j} \frac{e\hbar}{mc} \right], & l &= j - 1/2, \\ \bar{\mu}_z &= \frac{j_z}{j+1} \left[-\mu_0 + (2j+3) \frac{e\hbar}{4mc} \right], & l &= j + 1/2.\end{aligned}$$

Г л а в а 6

ДВИЖЕНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

6.1. На векторный потенциал должно быть наложено дополнительное условие $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$ (так называемая кулоновская калибровка); при этом $\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}$.

6.2. Как известно, в классической физике скорость и обобщенный импульс заряженной частицы в электромагнитном поле связаны соотношением

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\mu} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right).$$

Естественным квантовомеханическим обобщением этого соотношения является эрмитов оператор скорости частицы

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \quad (1)$$

(отметим, что более последовательный квантовомеханический способ установления вида оператора скорости (1) состоит в вычислении коммутатора $\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \mathbf{r}]$, см. 7.2).

Используя соотношение (1), легко находим

$$\begin{aligned}[\hat{v}_i, \hat{x}_k] &= -\frac{i\hbar}{\mu} \delta_{ik}, \\ [\hat{v}_i, \hat{v}_k] &= -\frac{e}{\mu^2 c} \{ [\hat{p}_i, A_k] + [A_i, \hat{p}_k] \} = \\ &= \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} \left\{ \frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k} \right\} = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} \varepsilon_{ikl} \mathcal{H}_l.\end{aligned} \quad (2)$$

Второй из коммутаторов (2) можно записать в векторной форме:

$$\hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{v}} = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} \mathcal{H}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

(если читатель недостаточно свободно владеет формулами векторного анализа, то для получения соотношений (2), (3) ему предлагается рассмотреть конкретные коммутаторы $[\hat{v}_x, \hat{v}_y]$, $[\hat{v}_x, \hat{v}_z]$ и т. д. и учесть, что $\mathcal{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$).

6.3. В классической механике движение заряженной частицы в однородном магнитном поле в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, происходит по окружности (ларморовская

орбита), квадрат радиуса которой ρ_{\perp}^2 равен

$$\rho_{\perp}^2 = \frac{1}{\omega_0^2} v_{\perp}^2 = \frac{1}{\omega_0^2} (v_x^2 + v_y^2), \quad (1)$$

где $\omega_0 = |e| \mathcal{H} / \mu c$ и ось z направлена вдоль магнитного поля.

Векторы ρ , ρ_0 , v_{\perp} — радиусы-векторы частицы, центра орбиты (окружности) и скорость частицы в плоскости x, y — связаны соотношением

$$[\omega(\rho - \rho_0)] = v_{\perp}, \quad (2)$$

где компоненты вектора ω равны $\omega = (0, 0, \omega = \frac{-e\mathcal{H}}{\mu c} = \frac{-e}{|e|} \omega_0)$. Формула (2) выражает характер движения частицы в плоскости x, y — равномерное вращение, причем знак ω определяет направление вращения.

Из выражения (2) следует:

$$x_0 = x - \frac{1}{\omega} v_y, \quad y_0 = y + \frac{1}{\omega} v_x, \quad \rho_0^2 = x_0^2 + y_0^2.$$

В качестве квантовомеханического обобщения величин $x_0, y_0, \rho_0^2, \rho_{\perp}^2$ естественно ввести операторы соответствующих величин вида

$$\begin{aligned} \hat{x}_0 &= \hat{x} - \frac{1}{\omega} \hat{v}_y = x - \frac{1}{\mu\omega} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right), \\ \hat{y}_0 &= \hat{y} + \frac{1}{\omega} \hat{v}_x, \quad \hat{\rho}_0^2 = \hat{x}_0^2 + \hat{y}_0^2, \quad \hat{\rho}_{\perp}^2 = \frac{1}{\omega^2} (\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2), \end{aligned}$$

где оператор скорости \hat{v} был введен в предыдущей задаче.

Легко установить следующие коммутационные соотношения *):

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}_0] &= [\hat{H}, \hat{y}_0] = [\hat{H}, \hat{\rho}_0^2] = [\hat{H}, \hat{\rho}_{\perp}^2] = 0, \\ [\hat{x}_0, \hat{y}_0] &= -\frac{i\hbar c}{e\mathcal{H}}, \quad [\hat{\rho}_0^2, \hat{\rho}_{\perp}^2] = 0 \end{aligned}$$

(при вычислении коммутаторов полезно иметь в виду результаты предыдущей задачи и задачи 1.9). Коммутативность рассматриваемых операторов с гамильтонианом означает, что величины x_0, y_0, ρ_0^2 и ρ_{\perp}^2 являются интегралами движения, как и в классическом случае.

*) Напомним: $\hat{H} = \frac{(\hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A})^2}{2\mu} \equiv \frac{\mu \hat{v}^2}{2}$, $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A} = (0, 0, \mathcal{H})$.

Решение задачи можно получить, не конкретизируя калибровку векторного потенциала, однако вычисления несколько упрощаются, если воспользоваться выбором \mathbf{A} в виде $\mathbf{A} = (0, \mathcal{H}x, 0)$.

6.4. а) Операторы \hat{p}_y и \hat{p}_z коммутируют друг с другом и с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left\{ \hat{p}_x^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} \mathcal{H}_0 x \right)^2 + \hat{p}_z^2 \right\},$$

и поэтому с. ф. гамильтониана одновременно могут быть выбраны и с. ф. операторов \hat{p}_y и \hat{p}_z . Эти функции имеют вид

$$\Psi_{E p_y p_z}(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right] \psi(x). \quad (1)$$

Энергетические уровни частицы и зависимость с. ф. от переменной x определяются из уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \psi''(x) + \frac{1}{2\mu} \left(p_y - \frac{e\mathcal{H}_0 x}{c} \right)^2 \psi(x) = E_t \psi(x), \quad (2)$$

где введена энергия E_t поперечного движения:

$$E_t = E - p_z^2/2\mu.$$

Так как решение уравнения (2) очевидным образом выражается через хорошо известное решение у. Ш. для линейного гармонического осциллятора, то находим с. ф. и энергетические уровни частицы в виде

$$\Psi_{n p_y p_z}(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right] \Psi_n^{\text{осц}}\left(x - \frac{c p_y}{e\mathcal{H}_0}\right),$$

$$E_{n p_z} = \frac{|e| \hbar \mathcal{H}_0}{\mu c} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2\mu}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Отметим, что энергетические уровни поперечного движения частицы

$$(E_t)_n = \frac{|e| \hbar \mathcal{H}_0}{\mu c} \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

являются дискретными. Кратность их вырождения бесконечна (энергия не зависит от величины p_y , принимающей произвольные значения $-\infty < p_y < +\infty$). «Поперечная» часть с. ф. $\Psi_{n p_y p_z}$ не является нормируемой на единицу. Поэтому в этих стационарных состояниях частица не является локализованной в ограниченной области пространства (в поперечном направлении), несмотря на дискретный характер энергетического спектра (см. также 6.10).

$$б) \Psi_{n p_x p_z} = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)\right] \Psi_n^{\text{осц}}\left(y + \frac{c p_x}{e\mathcal{H}_0}\right),$$

уровни энергии $E_{n p_z}$ не зависят, разумеется, от калибровки векторного потенциала, т. е. выражаются той же формулой, что и в п. а.

6.5. Так как обе системы с. ф. гамильтониана: $\Psi_{np_y p_z}(x, y, z)$ и $\Psi_{n'p'_y p'_z}(x, y, z)$ — являются полными, то каждая функция из одной системы может быть представлена в виде суперпозиции с. ф., относящихся к другой; в частности,

$$\Psi_{np_x p_z}(x, y, z) = \sum_{n'} \int C_{np_x p_z}^{n' p'_y p'_z} \Psi_{n' p'_y p'_z}(x, y, z) dp'_y dp'_z. \quad (1)$$

Коэффициенты в этом разложении можно вычислить по общей формуле

$$C_{np_x p_z}^{n' p'_y p'_z} = \int \Psi_{n' p'_y p'_z}^* \Psi_{np_x p_z} dV. \quad (2)$$

Так как рассматриваемые системы функций описывают одну и ту же физическую систему — частицу в однородном магнитном поле, энергия поперечного движения которой однозначно определяется квантовым числом n (или n'), то на первый взгляд может показаться, что коэффициенты $C_{np_x p_z}^{n' p'_y p'_z}$ отличны от нуля лишь при $n = n'$. Однако это не так! Дело в том, что хотя физическая система одна и та же, но формально она характеризуется различными гамильтонианами, вид которых зависит от конкретного выбора калибровки векторного потенциала. Соответственно, с. ф. гамильтониана при одном выборе калибровки уже не будут его с. ф. при другом выборе.

Для получения соотношения между рассматриваемыми в. ф., в которое входили бы лишь в. ф. с $n = n'$, следует учесть, что калибровочное преобразование потенциалов можно рассматривать как унитарное преобразование, осуществляемое оператором

$$\hat{U} = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} f\right),$$

где f определяет калибровочное преобразование

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f.$$

Для рассматриваемого случая $\mathbf{A} = (0, \mathcal{H}x, 0)$, $\mathbf{A}' = (-\mathcal{H}y, 0, 0)$, так что $f = -\mathcal{H}xy$. Так как с. ф. $\Psi_{np_y p_z}$ гамильтониана \hat{H} (в калибровке \mathbf{A}) при унитарном преобразовании $\Psi' = \hat{U} \Psi_{np_y p_z}$ становятся с. ф. гамильтониана \hat{H}' (для калибровки \mathbf{A}'), отвечающими тем же самым с. з., то искомое соотношение имеет вид

$$\Psi_{np_x p_z} = \exp\left(-\frac{ie\mathcal{H}}{\hbar c} xy\right) \int C_{p_x}^{p_y}(n) \Psi_{np_y p_z} dp_y.$$

6.6. Гамильтониан имеет вид ($\hat{h}\hat{\mathbf{I}} = [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar[\mathbf{r}\nabla]$)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}_0 \hat{\mathbf{I}} + \frac{e^2}{8\mu c^2} [\mathcal{H}_0 \mathbf{r}]^2.$$

Выбрав ось z направленной вдоль поля \mathcal{H}_0 , замечаем, что операторы \hat{l}_z и \hat{p}_z коммутируют друг с другом и с гамильтонианом. Поэтому с. ф. оператора \hat{H} можно выбрать одновременно и с. ф. операторов \hat{l}_z и \hat{p}_z . Эти функции имеют вид (в цилиндрических координатах)

$$\Psi_{Emp_z}(\rho, z, \varphi) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\hbar}} \exp\left[i\left(m\varphi + \frac{p_z z}{\hbar}\right)\right] f(\rho), \quad (1)$$

где функция $f(\rho)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} f + \left[\frac{2\mu E_t}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{em\mathcal{H}_0}{\hbar c} - \frac{e^2\mathcal{H}_0^2\rho^2}{4\hbar^2 c^2} \right] f = 0, \quad (2)$$

определяющему также энергетический спектр поперечного движения: $E_t = E - p_z^2/2\mu$.

Вводя обозначения

$$a = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|\mathcal{H}_0}} > 0, \quad k_t^2 = \frac{2\mu E_t}{\hbar^2} = \frac{1}{\hbar^2} (2\mu E - p_z^2) \quad (3)$$

и сделав замену переменной $x = \rho^2/2a^2$, можно преобразовать уравнение (2) к виду

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{df}{dx} + \left[\frac{k_t^2 a^2}{2x} - \frac{m^2}{4x^2} + \frac{e}{|e|} \frac{m}{2x} - \frac{1}{4} \right] f = 0. \quad (4)$$

Решение этого уравнения ищем в виде

$$f(x) = e^{-x/2} x^{|m|/2} w(x). \quad (5)$$

При этом уравнение (4) принимает вид

$$xw'' + (|m| + 1 - x)w' - \frac{1}{2} \left(1 + |m| - \frac{e}{|e|} m - k_t^2 a^2 \right) w = 0. \quad (6)$$

Решение этого уравнения следует выбрать в форме

$$w(x) = CF \left[\frac{1}{2} \left(1 + |m| - \frac{e}{|e|} m - k_t^2 a^2 \right), |m| + 1, x \right], \quad (7)$$

где F — вырожденная гипергеометрическая функция (второе, линейно независимое от (7) решение уравнения (6) расходится при x (и ρ) $\rightarrow 0$ и, следовательно, не удовлетворяет условию конечности в. ф. при $\rho \rightarrow 0$).

Функция $w(x)$ (7) должна сводиться к полиному: в противном случае она ведет себя как e^x при $x \rightarrow \infty$, и функция f (а с нею и с. ф. гамильтониана) оказывается растущей при x (и ρ) $\rightarrow \infty$ как $e^{x/2} = \exp(\rho^2/4a^2)$. Функция (7) сводится к полиному при выполнении условия

$$\frac{1}{2} \left(1 + |m| - \frac{e}{|e|} m - k_t^2 a^2 \right) = -r, \quad r = 0, 1, 2, \dots,$$

определяющего, тем самым, энергетический спектр поперечного движения частицы в однородном магнитном поле.

Введя обозначение

$$2n + 1 \equiv 2r + 1 + |m| - \frac{e}{|e|} m, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (8)$$

получаем следующее выражение для энергетических уровней поперечного движения:

$$(E_t)_n = \hbar\omega_0(n + 1/2), \quad \omega_0 = \frac{|e|\mathcal{H}_0}{\mu c}. \quad (9)$$

Из соотношений (8) и (9) следует, что энергетическому уровню $(E_t)_n$ с данным значением n соответствуют состояния частицы со значениями проекции момента m , равными

$$\begin{aligned} m &= -n, -n + 1, \dots, -1, 0, +1, \dots, +\infty \quad \text{при } e > 0, \\ m &= -\infty, \dots, -1, 0, +1, \dots, n \quad \text{при } e < 0, \end{aligned}$$

так что каждый уровень имеет бесконечную кратность вырождения.

С. ф. гамильтониана \hat{H} имеют вид

$$\Psi_{nmp_z} = C \left(\frac{\rho}{a}\right)^{|m|} \exp\left[im\varphi + \frac{i}{\hbar} p_z z - \frac{\rho^2}{4a^2}\right] F(-r, |m| + 1, \rho^2/2a^2), \quad (10)$$

где r выражается через n, m согласно (8).

Отметим, что найденные с. ф. гамильтониана (10) описывают стационарные состояния частицы в однородном магнитном поле, локализованные в поперечном направлении, и, следовательно, они могут быть нормированы на единицу (в плоскости x, y).

6.7. Спектр с. з. операторов $\hat{\rho}_0^2$ и $\hat{\rho}_\perp^2$ проще всего установить, используя формальную аналогию с оператором Гамильтона линейного осциллятора, для которого из одних лишь соотношений

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} + \frac{k\hat{Q}^2}{2}, \quad [\hat{P}, \hat{Q}] = \frac{\hbar}{i}$$

вытекает вид энергетического спектра: $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, $\omega = \sqrt{k/\mu}$, $n = 0, 1, \dots$

Представив $\hat{\rho}_\perp^2$ в виде (см. 6.2 и 6.3)

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_\perp^2 &= \frac{1}{\omega_0^2} (\hat{\rho}_x^2 + \hat{\rho}_y^2) \equiv \frac{\hat{P}^2}{\omega_0^2} + \frac{\hat{Q}^2}{\omega_0^2}, \quad \hat{P} \equiv \hat{\rho}_x, \quad \hat{Q} \equiv \hat{\rho}_y, \quad (1) \\ [\hat{P}, \hat{Q}] &= \frac{ie\hbar\mathcal{H}_0}{c\mu^2} \end{aligned}$$

(ось z направлена вдоль магнитного поля), замечаем, что выражения (1) описывают «осциллятор» с $\mu = \omega_0^2/2$ и $k = 2/\omega_0^2$, причем роль \hbar играет величина $|e|\hbar\mathcal{H}_0/c\mu^2$ (отметим, что спектр $\hat{\rho}_\perp^2$ не зависит от знака правой части коммутатора в выражении (1)).

Таким образом, находим спектр с. з. оператора $\hat{\rho}_n^2$:

$$(\rho_n^2)_n = a^2(2n + 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (a^2 = \hbar c / |e| \mathcal{H}_0).$$

Совершенно аналогично находим спектр оператора $\hat{\rho}_0^2$:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_0^2 &= \hat{x}_0^2 + \hat{y}_0^2, \quad [\hat{x}_0, \hat{y}_0] = -i\hbar c / e \mathcal{H}_0, \\ (\rho_0^2)_k &= a^2(2k + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Отметим, что имеют место соотношения

$$\hat{\rho}_n^2 = 2\hat{H}_t / \mu \omega_0^2, \quad (2)$$

$$\hat{\rho}_0^2 = \frac{2\hat{H}_t}{\mu \omega_0^2} - \frac{2}{\mu \omega} \hat{l}_z \quad \left(\omega = -\frac{e}{|e|} \omega_0 \right), \quad (3)$$

где \hat{H}_t — гамильтониан поперечного движения частицы в магнитном поле ($\hat{H}_t = \hat{H} - \hat{p}_z^2 / 2\mu$). При получении (3) была использована следующая калибровка векторного потенциала: $\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathcal{H}_0 \mathbf{r}]$. Из (2) и (3) следует, что в. ф. $\Psi_{nm\rho_z}$, полученные в предыдущей задаче, являются с. ф. операторов $\hat{\rho}_0^2$ и $\hat{\rho}_n^2$, отвечающими с. з.:

$$(\rho_n^2)_n = a^2(2n + 1), \quad (\rho_0^2)_k = a^2(2k + 1), \quad k = n + \frac{e}{|e|} m.$$

6.8. Обозначив через Ψ_n в. ф. рассматриваемых состояний, имеем, согласно 6.6,

$$|\Psi_n|^2 = C^2 (\rho/a)^{2n} e^{-\rho^2/2a^2}. \quad (1)$$

Используя хорошо известные формулы

$$\Gamma(\nu) = \int_0^\infty e^{-x} x^{\nu-1} dx, \quad \Gamma(n) = (n-1)!,$$

$$\Gamma(2x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} 2^{2x-1} \Gamma(x) \Gamma(x+1/2),$$

легко нормировать выражение (1) на единицу (в плоскости x, y) и найти следующие средние:

$$\bar{\rho} = \int_0^\infty \rho |\Psi_n|^2 2\pi\rho d\rho = a \sqrt{2} \frac{\Gamma(n+3/2)}{\Gamma(n+1)},$$

$$\bar{\rho}^2 = 2\pi \int_0^\infty \rho^3 |\Psi_n|^2 d\rho = 2a^2(n+1), \quad \pi a^2 C^2 = [2^{n+1} \Gamma(n+1)]^{-1}.$$

Наиболее вероятное значение $\rho_{н.в}$ переменной ρ , которому отвечает максимум функции $2\pi\rho|\Psi_n|^2$ — плотности вероятности распределения по ρ , — равно $\rho_{н.в} = a\sqrt{2n+1}$.

В состояниях, описываемых в. ф. Ψ_n , операторы $\hat{\rho}_0^2$ и $\hat{\rho}_n^2$ имеют определенные значения (см. предыдущую задачу), равные

$$(\rho_0^2)_0 = a^2, \quad (\rho_n^2)_n = a^2(2n+1).$$

В случае $n \gg 1$ (квазиклассический предел), учитывая асимптотическое поведение $\Gamma(x)$ при $x \rightarrow \infty$:

$$\Gamma(x) \approx \sqrt{2\pi} x^{x-1/2} e^{-x},$$

находим согласно (2) $\bar{\rho} \approx a\sqrt{2n}$, и, таким образом,

$$\rho_{н.в} = \sqrt{(\rho_n^2)_n} \approx \sqrt{\rho^2} \approx \bar{\rho} \approx a\sqrt{2n} \gg a. \quad (3)$$

Соотношения (3) означают, что радиальное (по ρ) распределение частицы при $n \gg 1$ имеет узкий максимум вблизи значения $\rho_{н.в}$. Величину $2\pi\rho|\Psi_n|^2$ при этом можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} 2\pi\rho|\Psi_n|^2 &= \tilde{C}(\rho/a)^{2n+1} \exp(-\rho^2/2a^2) = \\ &= \tilde{C} \exp\left\{-\frac{\rho^2}{2a^2} + (2n+1)\ln\frac{\rho}{a}\right\} \approx \tilde{C} \exp\left\{-\frac{(\rho - \rho_{н.в})^2}{a^2}\right\}, \quad (4) \\ \tilde{C} &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \end{aligned}$$

(здесь показатель экспоненты разложен в ряд вблизи максимума, достигаемого в точке $\rho_{н.в}$). Из (4) следует

$$\Delta\rho \equiv \sqrt{\rho^2 - \bar{\rho}^2} \approx a/\sqrt{2} \ll \bar{\rho}.$$

Таким образом, вероятность нахождения частицы заметно отлична от нуля лишь в узкой кольцеобразной области с радиусом $a\sqrt{2n}$ и шириной порядка a . Это соответствует переходу к классической картине — круговой орбите частицы, причем найденный радиус орбиты связан с энергией частицы точно так же, как и в классической механике. Отметим, что равенство $m = -\frac{e}{|e|}n$, справедливое для рассматриваемых состояний частицы, при $n \gg 1$ после подстановки $m = M_z/\hbar$ и $n \approx E_t/\hbar\omega_0$ переходит в классическую связь между моментом частицы относительно центра орбиты и энергией ее поперечного движения:

$$E_t = \omega\mathbf{M} = \frac{|e|\hbar\omega_0}{\mu c} |M_z|.$$

Это соотношение легко получить из классических выражений

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= [\mathbf{r}\mathbf{p}], \quad \mathbf{v}_t = [\omega\mathbf{r}], \quad \omega = -\frac{e\mathcal{H}_0}{\mu c}, \\ \mathbf{r}\cdot\mathbf{v} &= \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} = \mathbf{p} - \frac{e}{2c}[\mathcal{H}_0\mathbf{r}] \end{aligned}$$

(по поводу ω см. 6.3), проделав следующее преобразование:

$$\begin{aligned} E_t &= \frac{\mu v_t^2}{2} = \frac{1}{2} [\omega r] \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2} \mu [\omega r] \right) = \\ &= \frac{1}{2} \omega \mathbf{M} + \frac{1}{4} \mu v_t^2 = \frac{1}{2} \omega \mathbf{M} + \frac{1}{2} E_t. \end{aligned}$$

6.9. Для рассматриваемых состояний $n=0$, $m = \frac{e}{|e|} |m|$ имеем, согласно 6.6,

$$|\Psi_{n=0, m, p_z}|^2 = C^2 (\rho/a)^{2|m|} e^{-\rho^2/2a^2}. \quad (1)$$

Так как выражение (1) отличается от соответствующего выражения (1) предыдущей задачи только заменой n на $|m|$, то все характеристики пространственного распределения частицы: $\bar{\rho}$, $\bar{\rho}^2$, $\rho_{н.в}$ и вид $|\Psi|^2$ при $|m| \gg 1$ получаются непосредственно из результатов предыдущей задачи (мы их не выписываем).

Однако интерпретация рассматриваемых состояний имеет мало общего с предыдущей задачей. Энергия поперечного движения при $n=0$ принимает минимальное значение, равное $(E_t)_0 = \hbar\omega_0/2$, и такие состояния являются существенно «неклассическими».

В рассматриваемых состояниях операторы $\hat{\rho}_0^2$ и $\hat{\rho}_n^2$ имеют определенные значения (см. 6.7), равные

$$(\rho_0^2)_{|m|} = a^2 (2|m| + 1), \quad (\rho_n^2)_0 = a^2.$$

При $|m| \gg 1$, когда

$$\bar{\rho} \approx \sqrt{\bar{\rho}^2} \approx \rho_{н.в} = \sqrt{(\rho_0^2)_{|m|}} \approx a \sqrt{2|m|} \gg a,$$

радиальное распределение частицы имеет узкий максимум вблизи $\rho_{н.в}$, причем ширина этого максимума имеет порядок величины a (см. предыдущую задачу). Рассматриваемым состояниям можно сопоставить следующую классическую картину: однородное распределение орбит минимального радиуса (равного $\sqrt{(\rho_n^2)_0} = a$) по узкой кольцеобразной области с радиусом $R = a \sqrt{2|m|} \gg a$ и шириной порядка a .

6.10. В стационарных состояниях д.с. в поле $U(\mathbf{r})$ частица всегда локализована в ограниченной области пространства.

Необычное свойство состояний д.с. поперечного движения частицы в однородном магнитном поле связано с тем обстоятельством, что энергетические уровни имеют бесконечную кратность вырождения.

Рассмотрим волновой пакет, составленный из с.ф. Ψ_{np_y} (см. 6.4, зависимость в.ф. от переменной z опускаем):

$$\Psi_n = \int C(p_y) \Psi_{np_y}(x, y) dp_y. \quad (1)$$

Очевидно, что в. ф. (1) является с. ф. гамильтониана \hat{H}_t , причем если

$$\int |C(p_y)|^2 dp_y = 1, \quad (2)$$

то эта функция нормирована на единицу, т. е. описывает локализованную частицу. В частности, в. ф. Ψ_{nm} (см. 6.6) удовлетворяют условиям (1) и (2).

И наоборот, из нормированных с. ф. Ψ_{nm} можно составить в. ф. вида

$$\tilde{\Psi}_n = \sum_m C_m(n) \Psi_{nm},$$

которые также являются с. ф. оператора \hat{H}_t , однако в случае $\sum |C_m|^2 = \infty$ эти функции описывают частицу, не локализованную в ограниченной области плоскости x, y .

6.11. Направив ось z вдоль магнитного поля, ось x — вдоль электрического и используя калибровку векторного потенциала вида $A_x = 0, A_y = \mathcal{H}x, A_z = 0$, имеем гамильтониан частицы

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} \mathcal{H}x\right)^2}{2\mu} + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} - e\mathcal{E}x. \quad (1)$$

Так как операторы \hat{p}_y и \hat{p}_z коммутируют друг с другом и с гамильтонианом, то с. ф. гамильтониана можно выбрать в виде

$$\Psi_{E p_y p_z} = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right] f(x), \quad (2)$$

где функция $f(x)$ удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} f'' - e\mathcal{E}x f + \frac{\left(p_y - \frac{e}{c} \mathcal{H}x\right)^2}{2\mu} f = E_t f, \quad E_t = E - p_z^2/2\mu. \quad (3)$$

Уравнение (3) легко сводится к хорошо известному у. Ш. для линейного осциллятора, и, учитывая это обстоятельство, находим с. ф. гамильтониана (1) и соответствующие им уровни энергии в виде

$$\Psi_{n p_y p_z} = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right] \Psi_n^{\text{осц}}\left(x - \frac{c p_y}{e\mathcal{H}} - \frac{\mu c^2 \mathcal{E}}{e\mathcal{H}^2}\right), \quad (4)$$

$$E_{n p_y p_z} = \hbar\omega_0(n + 1/2) + \frac{p_z^2}{2\mu} - \frac{c\mathcal{E} p_y}{\mathcal{H}} - \frac{\mu c^2 \mathcal{E}^2}{2\mathcal{H}^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

где $\Psi_n^{\text{осц}}(x)$ — в. ф. стационарных состояний осциллятора с собственной частотой $\omega_0 = |e|\mathcal{H}/\mu c$.

При $\mathcal{E} = 0$ выражения (4) сводятся к решению задачи 6.4, а,

6.12. При калибровке векторного потенциала $\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathcal{H}r]$ гамильтониан принимает вид (в цилиндрических координатах q

осью z , направленной вдоль магнитного поля)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\rho^2 \partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{ie\mathcal{H}}{c\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] + \frac{kz^2}{2} + \left(\frac{k}{2} + \frac{e^2\mathcal{H}^2}{8\mu c^2} \right) \rho^2.$$

Операторы \hat{l}_z и $\hat{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{kz^2}{2}$ коммутируют друг с другом и с гамильтонианом, поэтому с. ф. оператора \hat{H} можно выбрать одновременно и с. ф. этих операторов, так что

$$\Psi_{Emn_2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Psi_{n_2}^{\text{осц}}(z) f(\rho), \quad n_2 = 0, 1, \dots, \quad (1)$$

а у. Ш. сводится к следующему уравнению для функции $f(\rho)$:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{df}{d\rho} + \left[\frac{m^2}{\rho^2} - \frac{e\mathcal{H}m}{c\hbar} + \left(\frac{\tilde{\omega}^2 \mu^2}{\hbar^2} + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{4c^2 \hbar^2} \right) \rho^2 - k_t^2 \right] f = 0, \quad (2)$$

где

$$\tilde{\omega} = \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \quad k_t^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E_t = \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - \hbar\tilde{\omega}(n_2 + 1/2)].$$

Сделав замену переменной $\xi = \rho^2/2a^2$, где

$$a = \left(\frac{e^2 \mathcal{H}^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{4\tilde{\omega}^2 \mu^2}{\hbar^2} \right)^{-1/4},$$

уравнение (2) можно преобразовать к виду

$$\frac{df^2}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{df}{d\xi} + \left[\frac{k_t^2 a^2}{2\xi} + \frac{e\mathcal{H}ma^2}{2\hbar c \xi} - \frac{m^2}{4\xi^2} - \frac{1}{4} \right] f = 0, \quad (3)$$

совершенно аналогичному виду уравнения (4) задачи 6.6 (с единственной заменой величины $k_t^2 a^2 + em/|e|$ на $k_t^2 a^2 + e\mathcal{H}ma^2/\hbar c$).

Используя решение задачи 6.6, находим из уравнения (3)

$$\begin{aligned} f_{n_1 m} &= C (\rho/a)^{|m|} \exp(-\rho^2/4a^2) F(-n_1, |m|+1, \rho^2/2a^2), \\ (E_t)_{n_1 m} &= -\frac{e\mathcal{H}m\hbar}{2\mu c} + \hbar \sqrt{\tilde{\omega}^2 + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{4\mu^2 c^2}} (1 + |m| + 2n_1), \\ n_1 &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (4)$$

Выражения (1) и (4) определяют с. ф. гамильтониана $\Psi_{n_1 m n_2}$ и энергетические уровни

$$E_{n_1 m n_2} = -\frac{e\hbar\mathcal{H}m}{2\mu c} + \hbar \sqrt{\tilde{\omega}^2 + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{4\mu^2 c^2}} (2n_1 + |m| + 1) + \hbar\tilde{\omega}(n_2 + 1/2). \quad (5)$$

Согласно (5) основному уровню соответствуют квантовые числа $n_1 = n_2 = m = 0$ и в слабом магнитном поле $|e|\mathcal{H}/\mu c \ll \tilde{\omega}$

$$E_{000} \approx 3\hbar\tilde{\omega}/2 + \frac{e^2\hbar\mathcal{H}^2}{8\mu^2c^2\tilde{\omega}}. \quad (6)$$

Из (6) находим значение χ_0 магнитной восприимчивости:

$$\chi_0 = -\frac{e^2\hbar}{4\mu^2c^2\tilde{\omega}} \left(\Delta E_0 = -\frac{\chi_0\mathcal{H}^2}{2} \right).$$

6.13. При калибровке векторного потенциала $\mathbf{A} = 1/2 [\mathcal{H}\mathbf{r}]$ гамильтониан поперечного движения заряженной частицы имеет вид

$$\hat{H}_t = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2} \hat{l}_z^2 - \frac{e\hbar\mathcal{H}}{2\mu c} \hat{l}_z + \frac{e^2\mathcal{H}^2\rho^2}{8\mu c^2}. \quad (1)$$

Положив в (1) $\rho = a = \text{const}$, находим гамильтониан плоского ротатора в магнитном поле ($I = \mu a^2$):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{ie\hbar\mathcal{H}}{2\mu c} \frac{d}{d\varphi} + \frac{e^2\mathcal{H}^2 I}{8\mu^2 c^2}.$$

Очевидно, с. ф. оператора $\hat{l}_z = -i\partial/\partial\varphi$ являются и с. ф. гамильтониана, и решение задачи имеет вид

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2)$$

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} - \frac{e\hbar\mathcal{H}m}{2\mu c} + \frac{e^2\mathcal{H}^2 I}{8\mu^2 c^2}.$$

Последнее слагаемое в выражении (2) для E_m можно опустить, так как оно является постоянной величиной, не зависящей от состояния ротатора. Как видно из (2), магнитное поле снимает двукратное вырождение возбужденных энергетических уровней свободного ротатора.

Интерпретация выражения (2) для E_m очевидна: в состоянии, описываемом в. ф. Ψ_m , ротатор имеет магнитный момент $\mathfrak{M}_z = \frac{e\hbar m}{2\mu c}$, энергия взаимодействия которого с магнитным полем равна

$$-\mathfrak{M}\mathcal{H} = -\frac{e\hbar\mathcal{H}m}{2\mu c}.$$

6.14. Утверждение задачи представляется очевидным, если иметь в виду следующие обстоятельства: 1) с.з. E_t гамильтониана поперечного движения частицы $\hat{H}_t = \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}}_t - \frac{e}{c} \mathbf{A}_t \right)^2$ являются положительными (см. 1.23); 2) вне соленоида частица является фактически свободной, однако при $E_t > 0$ не существует убывающих при $\rho \rightarrow \infty$ решений у. Ш. для свободной частицы.

Можно убедиться и непосредственно из вида у. Ш., что спектр оператора $\hat{H}_t (E_t > 0)$ является непрерывным. Для этого

воспользуемся следующим выбором векторного потенциала: $\mathbf{A} \equiv \mathbf{A}_t = \frac{1}{2} f(\rho) [\mathbf{n}_0 \mathbf{r}]$, где единичный вектор \mathbf{n}_0 направлен вдоль оси соленоида, а функция $f(\rho)$ и $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A} = (0, 0, \mathcal{H}(\rho))$ равны:

$$f(\rho) = \begin{cases} \mathcal{H}_0, & \rho < R, \\ \left(\frac{R}{\rho}\right)^2 \mathcal{H}_0, & \rho > R, \end{cases} \quad \mathcal{H}(\rho) = \begin{cases} \mathcal{H}_0, & \rho < R, \\ 0, & \rho > R. \end{cases}$$

Гамильтониан \hat{H}_t принимает вид

$$\hat{H}_t = \frac{1}{2\mu} \left[-\frac{\hbar^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\hbar^2}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{ie\hbar f(\rho)}{c} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 \rho^2 f^2(\rho)}{4c^2} \right].$$

С. ф. этого оператора можно выбрать в виде

$$\Psi_{E_t m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \frac{\chi(\rho)}{\sqrt{\rho}}.$$

При этом у. Ш. принимает вид обычного одномерного у. Ш. ($\chi(0) = 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \chi'' + \left[\frac{\hbar^2(m^2 - 1/4)}{2\mu\rho^2} - \frac{e\hbar m f(\rho)}{2\mu c} + \frac{e^2 \rho^2 f^2(\rho)}{8\mu c^2} \right] \chi = E_t \chi,$$

с эффективной потенциальной энергией

$$U_{\text{эфф}}(\rho) = \frac{1}{2\mu} \left\{ \left(\frac{\hbar m}{\rho} - \frac{e\rho f(\rho)}{2c} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{4\rho^2} \right\},$$

график которой приведен на рис. 28 (конкретный вид графика зависит от значений параметров m , \mathcal{H}_0 и др.; в этом смысле рисунок соответствует случаю $m \neq 0$ и достаточно большому значению \mathcal{H}_0 , так что $\mathcal{H}_0 R^2 \gg \hbar c / |e|$).

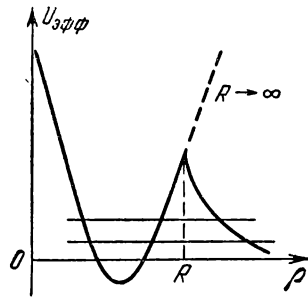


Рис. 28.

Имея в виду общие соображения о характере энергетического спектра в зависимости от вида потенциала, легко заметить, что для $U_{\text{эфф}}$ данной задачи при любом $E_t > 0$ существует одно (и только одно) решение у. Ш. (второе решение расходится при $\rho \rightarrow 0$). Это решение, очевидно, не убывает при $\rho \rightarrow \infty$, так что оно описывает частицу, не локализованную в ограниченной области пространства.

В то же время рисунок позволяет понять качественное различие между случаями $R \neq \infty$ и $R = \infty$. При $R \neq \infty$ в рассматриваемой задаче существуют квазидискретные уровни энергии (нижние из них изображены на рисунке). При $R \rightarrow \infty$ ширина этих уровней стремится к нулю и они переходят в обычные уровни д. с. заряженной частицы в однородном магнитном поле.

6.15. Решение задачи легко получить, основываясь на соображениях, высказанных при решении предыдущей задачи.

6.16. Для решения задачи воспользуемся вариационным методом.

При калибровке векторного потенциала $\mathbf{A} = 1/2 [\mathcal{H}_0 \mathbf{r}]$ гамильтониан частицы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} + U(r), \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_t = -\frac{\hbar^2}{2\mu\rho} \frac{\partial}{\partial\rho} \rho \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2} \hat{l}_z^2 - \frac{e\hbar\mathcal{H}_0 \hat{l}_z}{2\mu c} + \frac{e^2 \mathcal{H}_0^2 \rho^2}{8\mu c^2}$$

(ось z направлена вдоль магнитного поля, используется цилиндрическая система координат).

Рассмотрим нормированные на единицу в. ф. вида

$$\Psi = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|z|} \Psi_{n=0,m}(\rho, \varphi), \quad (2)$$

где $\Psi_{n=0,m}$ — нормированная на единицу (в плоскости x, y) «поперечная» часть в. ф. Ψ_{nmp_z} задачи 6.6. Найдем среднее значение гамильтониана (1) в состоянии, описываемом в. ф. (2):

$$\begin{aligned} \bar{E}(\kappa) &= \int \Psi^* \hat{H} \Psi \rho d\rho d\varphi dz = \\ &= \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu} + \kappa \int U(r) e^{-2\kappa|z|} |\Psi_{n=0,m}|^2 dV \end{aligned} \quad (3)$$

($\omega_0 = |e|\mathcal{H}_0/\mu c$). Из выражения (3) следует ($U(r) \leq 0$), что при достаточно малых значениях параметра κ

$$\bar{E}(\kappa) < \hbar\omega_0/2, \quad (4)$$

а так как минимальное значение энергии частицы в однородном магнитном поле равно $\hbar\omega_0/2$, то неравенство (4) означает, что гамильтониан (1) имеет с. з., меньшие $\hbar\omega_0/2$, и в соответствующих состояниях частица не может уйти на бесконечность, т. е. локализована в ограниченной области пространства (как в плоскости x, y , так и вдоль оси z). Отметим, что число таких состояний бесконечно велико, как и число различных значений величины m .

6.17. Направив ось z вдоль магнитного поля, имеем гамильтониан частицы

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \hat{\mu}\mathcal{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \mu_0\mathcal{H}_0\hat{s}_z. \quad (1)$$

Так как операторы $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{s}_z = \hat{\sigma}_z/2$ коммутируют друг с другом и с гамильтонианом (1), то с. ф. и с. з. оператора \hat{H} имеют вид

$$\Psi_{\mathbf{p}s_z} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right) \chi_{s_z}, \quad E_{\mathbf{p}s_z} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - 2\mu_0\mathcal{H}_0 s_z,$$

где

$$\chi_{s_z=+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{s_z=-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

6.18. Выбрав ось z в направлении вектора \mathcal{H}_0 внутри соленоида, имеем гамильтониан поперечного движения нейтрона

$$\hat{H}_t = \frac{\hat{p}_t^2}{2\mu} - \mu_0 \mathcal{H}(\rho) \hat{\sigma}_z,$$

где

$$\mathcal{H}(\rho) = \begin{cases} \mathcal{H}_0, & \rho < R \\ 0, & \rho > R \end{cases} \quad (R - \text{радиус соленоида}),$$

(μ_0 — магнитный момент нейтрона). Так как оператор $\hat{s}_z = \hat{\sigma}_z/2$ коммутирует с гамильтонианом, то с. ф. H_t можно выбрать в виде

$$\Psi_{E_t s_z} = f(\rho, \varphi) \chi_{s_z},$$

где χ_{s_z} — с. ф. оператора \hat{s}_z , отвечающие с. з. $s_z = \pm 1/2$. При этом задача определения функции $f(\rho, \varphi)$ сводится к решению у. Ш. в двумерном поле $U(\rho)$ вида

$$U(\rho) = \begin{cases} -2\mu_0 \mathcal{H}_0 s_z \equiv -U_0, & \rho < R, \\ 0, & \rho > R. \end{cases} \quad (1)$$

Так как у нейтрона $\mu_0 < 0$, то при $s_z = +1/2$ потенциал (1) представляет потенциальный барьер и состояния д. с. отсутствуют. При $s_z = -1/2$ поле $U(\rho)$ является потенциальной ямой радиуса R и глубины $U_0 = |\mu_0 \mathcal{H}_0|$. Стационарные состояния д. с. в такой яме были рассмотрены ранее в задачах 4.9 и 4.10.

6.19. Гамильтониан частицы в цилиндрических координатах с осью z , направленной вдоль магнитного поля, имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \mu_0 \mathcal{H}(\rho) \hat{\sigma}_z.$$

Операторы \hat{s}_z , \hat{p}_z , \hat{l}_z коммутируют друг с другом и с гамильтонианом, и поэтому с. ф. оператора \hat{H} можно представить в виде

$$\Psi_{E p_z m s_z} = \frac{1}{2\pi \sqrt{\hbar}} \exp \left[i \left(m\varphi + \frac{p_z z}{\hbar} \right) \right] f(\rho) \chi_{s_z},$$

где χ_{s_z} — спиновая в. ф. частицы, отвечающая определенной проекции s_z спина на ось z . Для определения функции $f(\rho)$ имеем уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right] f - 2\mu_0 s_z \mathcal{H}(\rho) f = E_t f, \quad (1)$$

где $E_t = E - p_z^2/2\mu$. Уравнение (1) определяет также и энергетический спектр поперечного движения частицы.

6.20. Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \mu_0 \mathcal{H}(x) \hat{\sigma}_z.$$

Операторы \hat{s}_z , \hat{p}_y , \hat{p}_z коммутируют друг с другом и с гамильтонианом, и поэтому с. ф. этих операторов могут являться одновременно и с. ф. гамильтониана. В рассматриваемом процессе отражения нейтрона от поверхности раздела «вакуум — магнитное поле» он имеет по условию задачи определенные значения величин s_z , p_y , p_z и энергии E . Поэтому в. ф. может быть представлена в виде

$$\Psi_{E p_y p_z s_z} = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right] f(x) \chi_{s_z},$$

где χ_{s_z} — спиновая функция нейтрона, отвечающая определенному значению s_z проекции спина на ось z .

Функция $f(x)$ удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} f'' - 2\mu_0 s_z \mathcal{H}(x) f = E_l f, \quad (1)$$

где

$$E_l = E - (p_y^2 + p_z^2)/2\mu.$$

Значения энергии частицы E и энергии «продольного» движения E_l определяются условием задачи и равны

$$E_l = \begin{cases} p_x^2/2\mu, & \text{если частицы падают из области } x < 0, \\ & \text{при этом } p_x > 0 \text{ (в дальнейшем — случай } a), \\ p_x^2/2\mu - 2\mu_0 s_z \mathcal{H}_0, & \text{если частицы падают из области } x > 0, \\ & \text{при этом } p_x < 0 \text{ (случай } б). \end{cases}$$

Уравнение (1) следует решать при граничном условии, соответствующем физической постановке задачи об отражении и прохождении частиц:

$$f(x) \approx \begin{cases} C_1 e^{i p'_x x/\hbar}, & x \rightarrow +\infty, \quad p'_x > 0 \quad (\text{случай } a), \\ C_2 e^{i p'_x x/\hbar}, & x \rightarrow -\infty, \quad p'_x < 0 \quad (\text{случай } б), \end{cases}$$

где p'_x — соответствующая компонента импульса прошедших частиц:

$$p'_x = \pm \sqrt{p_x^2 \pm 4\mu_0 s_z \mathcal{H}_0}. \quad (2)$$

Задача определения функции $f(x)$ и коэффициента отражения нейтронов от поверхности раздела совершенно аналогична 2.46, и, используя результат решения последней задачи, находим

коэффициент отражения:

$$R = \left(\frac{|p_x| - |p'_x|}{|p_x| + |p'_x|} \right)^2 = \left(\frac{|p_x| - \sqrt{p_x^2 \pm 4\mu\mu_0 s_z \mathcal{H}_0}}{|p_x| + \sqrt{p_x^2 \pm 4\mu\mu_0 s_z \mathcal{H}_0}} \right)^2 \quad (3)$$

(знаки « \pm » в выражениях (2) и (3) относятся к случаям *a* и *b* соответственно).

Векторы (p_x, p_y, p_z) , $(-p_x, p_y, p_z)$, (p'_x, p_y, p_z) , представляющие импульсы падающих, отраженных и прошедших частиц, лежат в одной плоскости. Очевидно, угол падения равен углу отражения (углы отсчитываются от нормали к поверхности раздела, см. рис. 29), а связь углов преломления и падения определяется выражением

$$\operatorname{tg} \theta_{\text{пад}} = (\operatorname{tg} \theta_{\text{пр}}) \sqrt{1 \pm 4\mu\mu_0 s_z \mathcal{H}_0 / p_x^2}. \quad (4)$$

Формулы (3) и (4) справедливы при условии, что подкоренное выражение в них — неотрицательное. В противном случае имеет место полное отражение нейтронов от поверхности раздела ($R = 1$).

6.21. Гамильтониан частицы отличается от гамильтонианов, рассмотренных в 6.4 и 6.6, дополнительным слагаемым $-\mu_0 \mathcal{H}_0 \hat{\sigma}_z$. Решение задачи очевидным образом выражается через решения задач 6.4 и 6.6.

В частности, при калибровке векторного потенциала, использованной в 6.4, *a*, получаем с. ф. и с. з. гамильтониана:

$$\begin{aligned} \Psi_{np_y p_z s_z} &= \Psi_{np_y p_z}(x, y, z) \chi_{s_z}, \\ E_{np_z s_z} &= \frac{\hbar |e| \mathcal{H}_0}{\mu c} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2\mu} - 2\mu_0 \mathcal{H}_0 s_z. \end{aligned}$$

6.22. Используя свойства матриц Паули и соотношения задачи 6.2, находим

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right\}^2 &= \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k \mu^2 = \\ &= \mu^2 (\delta_{ik} + i \epsilon_{ikl} \hat{\sigma}_l) \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k = \mu^2 \hat{\mathbf{v}}^2 - \frac{e\hbar}{c} \mathcal{H}(\mathbf{r}) \hat{\sigma}, \end{aligned}$$

и утверждение задачи представляется очевидным, если учесть, что значение магнитного момента электрона и μ -мезона равно $\mu_0 = e\hbar/2\mu c$ (e , μ — заряд и масса соответствующей частицы).

Для других частиц со спином $s = 1/2$, у которых $\mu_0 \neq \frac{e\hbar}{2\mu c}$, гамильтониан Паули

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2}{2\mu} - \mu_0 \hat{\sigma} \mathcal{H} + e\varphi$$

отличается от приведенного в условии задачи.

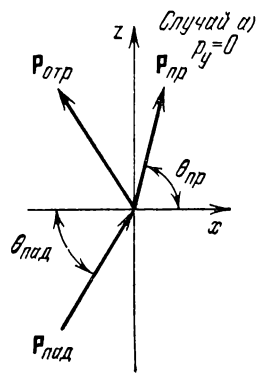


Рис. 29.

6.23. Гамильтониан электрона (а также позитрона и μ^\pm -мезонов, имеющих магнитный момент $\mu_0 = e\hbar/2\mu c$), согласно предыдущей задаче, можно записать в виде

$$\hat{H} = \frac{\mu}{2} (\hat{\sigma}\hat{v})^2,$$

и, очевидно, оператор $(\hat{\sigma}\hat{v})$ коммутирует с гамильтонианом.

6.24. Гамильтониан электрона, согласно 6.22, имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left\{ \hat{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \right\}^2,$$

и его с.з. являются неотрицательными, $E \geq 0$. Отсутствие связанных состояний электрона легко понять, если иметь в виду соображения, высказанные при решении задачи 6.14.

6.25. Согласно классической электродинамике магнитное поле тока с объемной плотностью $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ равно

$$\mathcal{H}(\mathbf{R}) = \frac{1}{c} \int \frac{[\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r})]}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^3} dV. \quad (1)$$

В отсутствие внешнего магнитного поля

$$\mathbf{j} = -\frac{ie\hbar}{2\mu} (\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi) \quad (2)$$

($-e$ — заряд частицы), и, учтя вид в. ф., легко находим, что в случае $1s$ -состояния $\mathbf{j} = 0$ и $\mathcal{H} \equiv 0$.

В. ф. произвольного $2p$ -состояния частицы имеет вид

$$\Psi = \sqrt{\frac{1}{32\pi a^5}} (\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r}) e^{-r/2a}, \quad (3)$$

где $a = \hbar^2/Ze^2\mu$ и $|\boldsymbol{\varepsilon}|^2 = 1$ (по поводу угловой зависимости в. ф. (3) см. 3.59 и 3.60). На основании (1)–(3) имеем

$$\mathcal{H}(0) = -\frac{ie\hbar}{64\pi\mu ca^5} \int \frac{e^{-r/a}}{r^3} [\mathbf{r}, \boldsymbol{\varepsilon}^*(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon}^*\mathbf{r})] dV \quad (4)$$

(при получении (4) полезно учесть, что в выражении (2) для тока следует действовать оператором ∇ лишь на множители $(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r})$ и $(\boldsymbol{\varepsilon}^*\mathbf{r})$ в в. ф., так как $[\mathbf{r}\nabla f(r)] = 0$; $\nabla(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r}) = \boldsymbol{\varepsilon}$).

Введя вектор $\mathbf{b} = [\boldsymbol{\varepsilon}^*\boldsymbol{\varepsilon}]$, легко находим

$$[\mathbf{r}, \boldsymbol{\varepsilon}^*(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon}^*\mathbf{r})] = [\mathbf{r}[\mathbf{r}\mathbf{b}]] = \mathbf{r}(\mathbf{r}\mathbf{b}) - \mathbf{b}r^2,$$

и интеграл, входящий в выражение (4), принимает вид

$$\int \frac{1}{r^3} e^{-r/a} \{\mathbf{r}(\mathbf{r}\mathbf{b}) - \mathbf{b}r^2\} dV \equiv \mathbf{I}. \quad (5)$$

Для вычисления вектора \mathbf{I} рассмотрим интеграл

$$\int \frac{1}{r^3} e^{-r/a} x_i x_k dV = C\delta_{ik}. \quad (6)$$

Взяв в соотношении (6) свертку по индексам i и k , имеем

$$3C = \int \frac{\exp(-r/a)}{r} dV = 4\pi a^2, \quad (7)$$

и из (5)–(7) следует $\mathbf{I} = -\frac{8\pi a^2}{3} \mathbf{b}$ и окончательное выражение для магнитного поля:

$$\mathcal{H}(0) = \frac{ie\hbar}{24\mu c a^3} [\mathbf{e}^* \mathbf{e}]. \quad (8)$$

В частности, в $2p$ -состояниях частицы с определенным значением m проекции момента на ось z , учитывая вид векторов $\mathbf{e}(m)$ (см. 3.60), имеем согласно выражению (8)

$$\mathcal{H}(0)_{m=0} = 0, \quad \mathcal{H}(0)_{m=\pm 1} = \left(0, 0, \mp \frac{e\hbar}{24\mu c a^3}\right).$$

6.26. Оператор магнитного момента бесспиновой частицы в отсутствие внешнего магнитного поля имеет вид ($-e$ — заряд частицы)

$$\hat{\mathfrak{M}} = -\frac{e\hbar}{2\mu c} \hat{\mathbf{I}},$$

и, очевидно, в условиях задачи его матричные элементы

$$(\hat{\mathfrak{M}})_{mn} = -\frac{e\hbar}{2\mu c} \int \Psi_m^* \hat{\mathbf{I}} \Psi_n dV \quad (1)$$

отличны от нуля лишь в том случае, если обе в. ф. Ψ_n и Ψ_m относятся к $2p$ -состояниям частицы (суперпозицию состояний $2s$ и $2p$ мы не рассматриваем).

Представив в. ф. Ψ_n и Ψ_m в виде, аналогичном выражению (3) предыдущей задачи, можно найти

$$(\hat{\mathfrak{M}})_{mn} = \frac{ie\hbar}{2\mu c} [\mathbf{e}_m^* \mathbf{e}_n] \quad (2)$$

(формулу (2) можно получить вычислением интеграла (1) аналогично тому, как это было сделано в предыдущей задаче; однако ее можно написать и без всяких вычислений, если воспользоваться результатом задачи 3.66).

6.27. Оператор орбитального момента частицы имеет вид $\hat{\mathbf{I}} = \frac{1}{\hbar} [\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}}]$. Магнитный момент заряженной частицы в классической теории имеет вид

$$\mathfrak{M} = \frac{e}{2c} [\mathbf{r} \mathbf{v}] = \frac{e}{2\mu c} \left[\mathbf{r} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]. \quad (1)$$

Квантовомеханическим обобщением соотношения (1) является оператор $\hat{\mathfrak{M}}$ магнитного момента бесспиновой частицы:

$$\hat{\mathfrak{M}} = \frac{e}{2\mu c} \left[\mathbf{r} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right],$$

или

$$\hat{\mathfrak{M}} = \frac{e\hbar}{2\mu c} \hat{\Gamma} - \frac{e^2}{2\mu c^2} [\mathbf{rA}]. \quad (2)$$

Усредняя обе части соотношения (2), находим

$$\overline{\mathfrak{M}} = \frac{e\hbar}{2\mu c} \bar{\Gamma} - \frac{e^2}{2\mu c^2} \overline{[\mathbf{rA}]}. \quad (3)$$

Установленное равенство (3) не противоречит калибровочной инвариантности. В заданном физическом состоянии частицы от калибровки потенциала не зависит значение $\overline{\mathfrak{M}}$, а величины $\bar{\Gamma}$ и $\overline{[\mathbf{rA}]}$ от нее зависят. При калибровочном преобразовании векторного потенциала $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f$ значение $\bar{\Gamma}$ изменяется по той причине, что изменяется в. ф.:

$$\Psi' = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} f\right) \Psi$$

(в. ф. Ψ при первоначальной калибровке потенциала и в. ф. Ψ' при новой его калибровке описывают одно и то же физическое состояние частицы!). При этом изменение величины $\bar{\Gamma}$ полностью компенсируется изменением второго слагаемого в правой части соотношения (3) вследствие калибровочного преобразования.

Отметим, что равенство (3) можно также получить, исходя из определения магнитного момента тока:

$$\mathfrak{M} = \frac{1}{2c} \int [\mathbf{rj}] dV,$$

если использовать известное выражение

$$\mathbf{j} = \frac{ie\hbar}{2\mu} (\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi) - \frac{e^2}{\mu c} \mathbf{A}\Psi^*\Psi \quad (4)$$

для плотности тока заряженной бесспиновой частицы в магнитном поле.

6.28. Учитывая явный вид в. ф. Ψ_{nmp_z} (см. формулу (10) задачи 6.6), используемую при этом калибровку векторного потенциала $\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathcal{H}_0 \mathbf{r}]$ и выражение для плотности тока заряженной бесспиновой частицы в магнитном поле (см. формулу (4) предыдущей задачи), находим (в цилиндрической системе координат)

$$j_\rho = 0, \quad j_z = \frac{ep_z}{\mu} |\Psi_{nmp_z}|^2, \quad j_\phi = \left(\frac{e\hbar m}{\mu\rho} - \frac{e^2 \mathcal{H}_0 \rho}{2\mu c} \right) |\Psi_{nmp_z}|^2.$$

6.29. Плотность тока заряженной частицы, имеющей спиновый магнитный момент, представляется в виде

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{орб}} + \mathbf{j}_{\text{сп}},$$

где первое слагаемое связано с орбитальным движением части-

цы и имеет вид, приведенный в формуле (4) задачи 6.27, а второе представляет ток спинового магнитного момента и для спина $s = 1/2$ равно

$$\mathbf{j}_{\text{сп}} = \mu_0 c \operatorname{rot} (\Psi^* \hat{\sigma} \Psi).$$

В. ф. рассматриваемых состояний имеют вид

$$\Psi \equiv \Psi_{nmp_z s_z} = \Psi_{nmp_z} \chi_{s_z},$$

где χ_{s_z} — с. ф. оператора \hat{s}_z . Таким образом,

$$\mu_0 \Psi^* \hat{\sigma} \Psi = (0, 0, 2\mu_0 s_z |\Psi_{nmp_z}|^2).$$

Учитывая, что величина $|\Psi_{nmp_z}|^2$ зависит только от переменной ρ , находим

$$(j_{\text{сп}})_\rho = (j_{\text{сп}})_z = 0, \quad (j_{\text{сп}})_\varphi = -2\mu_0 c s_z \frac{\partial}{\partial \rho} |\Psi_{nmp_z}|^2.$$

Ток орбитального движения в рассматриваемых состояниях имеет такой же вид, как и в 6.28.

6.30. В. ф. электрона имеет вид

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \chi \quad (a = \hbar^2 / Ze^2 \mu),$$

где χ — спиновая функция. В рассматриваемом состоянии плотность тока, связанного с орбитальным движением электрона, равна нулю и ток определяется спиновым магнитным моментом:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{сп}} = \mu_0 c \operatorname{rot} (\Psi^* \hat{\sigma} \Psi) = -\mu_0 c [\bar{\sigma} \nabla \rho],$$

где

$$\bar{\sigma} = \chi^* \hat{\sigma} \chi, \quad \rho(r) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a}.$$

Согласно известной формуле электродинамики векторный потенциал искомого магнитного поля равен

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}) = \frac{1}{c} \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}) dV}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = -\mu_0 \left[\bar{\sigma} \int \frac{\nabla \rho}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} dV \right].$$

Выполнив преобразования

$$\int \frac{\nabla \rho dV}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = \int \left\{ \nabla \frac{\rho(r)}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} - \rho \nabla \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \right\} dV = \nabla_{\mathbf{R}} \int \frac{\rho(r)}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} dV \quad (1)$$

(мы воспользовались теоремой Остроградского — Гаусса и соотношением $\nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{R} - \mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{R}} f(\mathbf{R} - \mathbf{r})$) и учтя, что интеграл, входящий в формулу (1), был вычислен в 4.29:

$$\int \frac{\rho(r) dV}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = \frac{1}{R} - \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{a} \right) e^{-2R/a} \equiv f(R),$$

находим выражение для векторного потенциала:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\mu_0 [\bar{\sigma} \nabla f(r)].$$

Мы не будем выписывать выражения для магнитного поля $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}$ при произвольных значениях \mathbf{r} , а приведем лишь предельные выражения:

$$\mathcal{H}(0) = \frac{8\mu_0\bar{\sigma}}{3a^3}, \quad \mathcal{H}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \frac{3(\mu\mathbf{r})\mathbf{r} - \mu r^2}{r^5}, \quad (2)$$

т. е. на больших расстояниях от атома магнитное поле является полем магнитного диполя, равного $\boldsymbol{\mu} = \mu_0\bar{\sigma}$.

6.31. В условиях задачи ток, создающий магнитное поле, является током спинового магнитного момента, равным

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{сп}} = \mu_0 c \text{rot} (\Psi^* \hat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi) = -\mu_0 c [\bar{\boldsymbol{\sigma}} \nabla \rho(r)],$$

где

$$\rho = |\Psi(r)|^2, \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \chi^* \hat{\boldsymbol{\sigma}} \chi, \quad \boldsymbol{\mu} \equiv \mu_0 \bar{\boldsymbol{\sigma}}$$

(мы учли, что в ф. рассматриваемого состояния частицы имеет вид $\Psi = \psi(r)\chi$).

Для нахождения магнитного поля в начале координат

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(0) &= \frac{1}{c} \int \frac{[\mathbf{r}\mathbf{j}(\mathbf{r})]}{r^3} dV = - \int \frac{1}{r^3} [\mathbf{r}[\boldsymbol{\mu}\nabla\rho]] dV = \\ &= - \int \frac{1}{r^3} \{ \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}\nabla\rho) - (\mathbf{r}\boldsymbol{\mu})\nabla\rho \} dV \end{aligned} \quad (1)$$

рассмотрим интеграл

$$\int \frac{1}{r^3} x_i \frac{\partial}{\partial x_k} \rho(r) dV = C\delta_{ik}. \quad (2)$$

Выполнив в выражении (2) свертку по индексам i и k и учитывая соотношение

$$\mathbf{r}\nabla\rho(r) = x_i \frac{\partial}{\partial x_i} \rho(r) = x_i \frac{x_i}{r} \frac{\partial}{\partial r} \rho(r) = r \frac{\partial}{\partial r} \rho(r),$$

находим

$$3C = \int \frac{1}{r^3} x_i \frac{\partial}{\partial x_i} \rho(r) dV = \int \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \rho(r) dV = -4\pi\rho(0). \quad (3)$$

Согласно (1), (2) и (3) имеем

$$\mathcal{H}(0) = \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu}\rho(0) = \frac{8\pi\mu_0}{3} \bar{\boldsymbol{\sigma}} |\Psi(0)|^2. \quad (4)$$

В частности, в случае $1s$ -состояния частицы в кулоновском поле из формулы (4) вытекает первое из соотношений (2) предыдущей задачи.

Г л а в а 7

ИЗМЕНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВО ВРЕМЕНИ

7.1. Из соотношения

$$\frac{d}{dt}(\hat{A}\hat{B}) = \frac{\partial}{\partial t}(\hat{A}\hat{B}) + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}\hat{B}]$$

после очевидных преобразований с использованием результата задачи 1.9 получаем требуемое правило дифференцирования:

$$\frac{d}{dt}(\hat{A}\hat{B}) = \hat{A}\dot{\hat{B}} + \dot{\hat{A}}\hat{B}.$$

7.2. Учитывая вид гамильтониана (в координатном представлении)

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)/c)^2}{2\mu} + e\varphi(\mathbf{r}, t),$$

где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, легко находим

$$\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{r}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \mathbf{r}] = \frac{1}{\mu}(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}).$$

7.3.

$$\dot{\hat{\mathbf{w}}} = \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt} = \frac{\partial\hat{\mathbf{v}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\mathbf{v}}] = \frac{e}{\mu}\boldsymbol{\varepsilon} + \frac{e}{2c\mu}\{[\hat{\mathbf{v}}\mathcal{H}] - [\mathcal{H}\hat{\mathbf{v}}]\}, \quad (1)$$

где

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}.$$

Соотношение (1) является естественным квантовомеханическим обобщением уравнения движения заряженной частицы в электромагнитном поле

$$\mu\dot{\mathbf{w}} \equiv \mu\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F} = e\boldsymbol{\varepsilon} + \frac{e}{c}[\mathbf{v}\mathcal{H}].$$

7.4. Усредняя оператор \hat{f} , находим

$$\bar{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n d\tau = -\frac{i}{\hbar} \int \Psi_n^* (\hat{f}\hat{H} - \hat{H}\hat{f}) \Psi_n d\tau = 0. \quad (1)$$

При получении соотношения (1) учтено, что $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$, и использована эрмитовость оператора \hat{H} .

7.5. а) Оператор силы $\hat{\mathbf{F}}$ в координатном представлении имеет вид $\hat{\mathbf{F}} = -\nabla U$. Так как $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2\mu + U$, то

$$\hat{\mathbf{F}} = -\nabla U \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = \dot{\hat{\mathbf{p}}},$$

и на основании результата предыдущей задачи находим $\bar{\mathbf{F}} = 0$.

б) Утверждение задачи можно доказать непосредственным усреднением оператора силы, выполнив следующие преобра-

зования:

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{F}} &= - \int \Psi_n^* (\text{grad } U) \Psi_n dV = \\ &= - \int \nabla (\Psi_n^* U \Psi_n) dV + \int \{(\text{grad } \Psi_n^*) U \Psi_n + \Psi_n^* U \text{grad } \Psi_n\} dV = \\ &= - \int \nabla (\Psi_n^* U \Psi_n) dV + E_n \int \nabla (\Psi_n^* \Psi_n) dV + \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{2\mu} \int \{(\nabla \Psi_n^*) (\Delta \Psi_n) + (\Delta \Psi_n^*) (\nabla \Psi_n)\} dV \quad (1)\end{aligned}$$

(мы учли, что в. ф. Ψ_n является с. ф. гамильтониана, т. е. $U \Psi_n = (E_n - \hat{\mathbf{p}}^2/2\mu) \Psi_n$). Воспользовавшись теоремой Остроградского—Гаусса, легко заметить, что выражение (1) равно нулю. При этом следует иметь в виду, что последний интеграл в выражении (1) можно преобразовать, учитывая коммутативность операторов ∇ и Δ и эрмитовость оператора Δ , к виду

$$\int \{(\nabla \Psi_n^*) (\Delta \Psi_n) + (\Delta \Psi_n^*) (\nabla \Psi_n)\} dV = \int \nabla (\Psi_n^* \Delta \Psi_n) dV = 0.$$

7.6. Теорема вириала классической механики утверждает, что если потенциальная энергия механической системы является однородной функцией ее (декартовых) координат и движение системы финитно, т. е. происходит в ограниченной области пространства, причем не происходит «падения» частиц друг на друга, то средние по времени значения кинетической и потенциальной энергии системы связаны соотношением

$$n\bar{U} = 2\bar{T}, \quad (1)$$

где n — степень однородности функции $U(x_1, x_2, \dots, x_{3N})$, N — число частиц системы, так что по теореме Эйлера об однородных функциях

$$nU = \sum_{i=1}^{3N} x_i \frac{\partial U}{\partial x_i} = \sum_{a=1}^N \mathbf{r}_a \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_a}. \quad (2)$$

Теорема (1) остается справедливой и в квантовой механике, если только под усреднением понимать квантовомеханическое усреднение по в. ф. стационарного состояния д. с. (это означает, что если рассматриваемая система является замкнутой, то из рассмотрения исключается движение ее центра масс).

а) Учитывая операторные соотношения

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}_a}{dt} = \hat{\mathbf{r}}_a = \frac{1}{\mu_a} \hat{\mathbf{p}}_a, \quad \frac{d\hat{\mathbf{p}}_a}{dt} = \hat{\mathbf{p}}_a = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_a},$$

результат задачи 7.1 и равенство (2), находим

$$\frac{d}{dt} \sum_{a=1}^N \hat{\mathbf{p}}_a \hat{\mathbf{r}}_a = \sum (\hat{\mathbf{p}}_a \hat{\mathbf{r}}_a + \hat{\mathbf{p}}_a \hat{\mathbf{r}}_a) = 2\hat{T} - n\hat{U}. \quad (3)$$

Доказательство квантовомеханической теоремы вириала следует непосредственно из усреднения операторного равенства (3) по в. ф. стационарного состояния д. с., если учесть результат задачи 7.4.

б) При доказательстве этим способом мы ограничимся случаем движения одной частицы во внешнем поле вида $U = \alpha r^n$. Обозначим через $\Psi_k(\mathbf{r})$ нормированные с. ф. гамильтониана, отвечающие с. з. д. с. Рассмотрим в. ф. вида

$$\tilde{\Psi}_k(\mathbf{r}) = (1 + \lambda)^{3/2} \Psi_k[(1 + \lambda)\mathbf{r}], \quad (4)$$

которые, как и с. ф. $\Psi_k(\mathbf{r})$, нормированы на единицу, и найдем среднее значение энергии частицы в состояниях, описываемых в. ф. (4):

$$\bar{E}_k(\lambda) = \int \tilde{\Psi}_k \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + U \right) \tilde{\Psi}_k dV = (1 + \lambda)^2 \bar{T}_{kk} + (1 + \lambda)^{-n} \bar{U}_{kk}, \quad (5)$$

где \bar{T}_{kk} , \bar{U}_{kk} — средние значения кинетической и потенциальной энергии частицы в состоянии $\Psi_k(\mathbf{r})$.

При $\lambda \rightarrow 0$ из соотношения (5) следует

$$\bar{E}_k(\lambda) \approx E_k + (2\bar{T}_{kk} - n\bar{U}_{kk})\lambda,$$

и условие экстремальности с. з. гамильтониана, требующее $\frac{\partial \bar{E}_k(\lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} = 0$, дает доказательство теоремы вириала.

в) Степенной потенциал $U = \alpha r^n$ характеризуется лишь одним размерным параметром α . Поэтому удобно представить потенциалы парного взаимодействия U_{ab} частиц a и b в виде

$$U_{ab} = \alpha C_{ab} |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|^n,$$

где C_{ab} — уже безразмерные величины. Удобно также представить массы частиц в виде $m_a = \mu_a m$, где m — некоторая эталонная масса, так что μ_a — безразмерные величины. При этом гамильтониан системы N частиц, взаимодействие которых друг с другом и с внешним полем (центр которого находится в точке $\mathbf{r} = 0$) описывается степенными потенциалами с одинаковым показателем n , принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_a \frac{\Delta_a}{\mu_a} + \sum_{a < b} \alpha C_{ab} |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|^n + \sum_a \alpha C_a r_a^n.$$

С. з. д. с. этого гамильтониана $E_k(m, \hbar, \alpha; C_a, C_{ab}, \mu_a, n)$ зависят только от трех размерных параметров: m , \hbar , α , из которых единственным способом можно составить комбинацию, имеющую размерность энергии:

$$e = \alpha \left(\frac{\hbar^2}{m\alpha} \right)^{\frac{n}{n+2}},$$

и нельзя образовать ни одного безразмерного параметра, так что из соображений размерности следует

$$E_k = \alpha \left(\frac{\hbar^2}{m\alpha} \right)^{\frac{n}{n+2}} \varepsilon_k(C_a, C_{ab}, \mu_a, n).$$

Учитывая, что $U \equiv \alpha \partial \hat{H} / \partial \alpha$, на основании результата задачи 1.28 находим

$$\bar{U}_{kk} = \alpha \frac{\partial E_k}{\partial \alpha} = \frac{2}{n+2} E_k.$$

Из этого соотношения и равенства $E_k = \bar{T}_{kk} + \bar{U}_{kk}$ следует, очевидно, утверждение теоремы вириала.

7.7. Оператор дипольного момента системы имеет вид $\hat{d}_i = e \sum_{a=1}^N x_{ai}$. Вводя оператор производной по времени от дипольного момента \hat{d}_i и воспользовавшись формулой

$$(\dot{d}_i)_{nm} = i \frac{E_n - E_m}{\hbar} (d_i)_{nm},$$

где E_m — энергетические уровни системы, легко получаем следующую цепочку равенств:

$$\begin{aligned} \sum_m (E_m - E_n) (d_i)_{nm} (d_k)_{mn} &= \frac{i\hbar}{2} \sum_m (\dot{d}_i)_{nm} (d_k)_{mn} - \\ &- \frac{i\hbar}{2} \sum_m (d_i)_{nm} (\dot{d}_k)_{mn} = \frac{i\hbar}{2} (\dot{d}_i d_k - d_i \dot{d}_k)_{nm} \quad (1) \end{aligned}$$

(при этом мы использовали правило умножения матриц).

Принимая во внимание определение \hat{d}_i и коммутативность операторов координаты \hat{x}_{ai} и скорости $\hat{x}_{bk} = \frac{\hbar}{i\mu} \frac{\partial}{\partial x_{bk}}$ для различных частиц ($a \neq b$), так что

$$\hat{x}_{ai} \hat{x}_{bk} - \hat{x}_{bk} \hat{x}_{ai} = \frac{\hbar}{i\mu} \delta_{ik} \delta_{ab},$$

находим из соотношения (1) при $i=k$ с учетом равенства $(d_i)_{nm} = (d_i)_{mn}^*$

$$\sum_m (E_m - E_n) |(d_i)_{nm}|^2 = \frac{i\hbar e^2}{2} \sum_{a=1}^N (\hat{x}_{ai} x_{ai} - x_{ai} \hat{x}_{ai})_{nn} = \frac{e^2 \hbar^2 N}{2\mu}, \quad (2)$$

что и требовалось доказать *).

*) Обращаем внимание на то, что в (2) нет суммирования по индексу i (т. е. оно справедливо для всех трех компонент). При выполнении такого суммирования следует заменить $|(d_i)_{nm}|^2$ на $|d_{nm}|^2$, а правую часть (2) умножить на 3.

Отметим также, что соотношение (2) очевидным образом может быть обобщено на случай системы, состоящей из частиц с различными значениями заряда и массы.

7.8. Запишем у. Ш. и уравнение, комплексно сопряженное к нему:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + \int U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t) dV', \quad (1)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi^*(\mathbf{r}, t) + \int U^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi^*(\mathbf{r}', t) dV'. \quad (2)$$

Умножив уравнение (1) слева на $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$, (2) — на $\Psi(\mathbf{r}, t)$ и произведя почленное вычитание, легко находим соотношение

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \Psi^*(\mathbf{r}, t) \int U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t) dV' - \Psi(\mathbf{r}, t) \int U^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi^*(\mathbf{r}', t) dV' \right\} \quad (3)$$

(вместо обычного уравнения непрерывности $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0$), где

$$\rho = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2\mu} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*).$$

Так как правая часть уравнения (3) отлична от нуля (за исключением случая локального потенциала, когда $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$), то локального закона сохранения вероятности нет (сравнить с 7.9). Легко, однако, заметить, что в интегральной форме в случае эрмитовости нелокального потенциала закон сохранения нормировки волновой функции состояния (числа частиц) имеет место: проинтегрировав соотношение (3) по всему пространству, находим

$$\frac{d}{dt} \int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 0, \quad \int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \text{const}$$

(интеграл от правой части (3) равен нулю в силу эрмитовости оператора U , равенство нулю интеграла от второго слагаемого в левой части (3) следует из теоремы Остроградского — Гаусса).

Отсутствие локального закона сохранения вероятности можно интерпретировать как рождение и уничтожение частиц в различных точках пространства. Сохранение же нормировки волновой функции состояния означает, что эти процессы имеют одинаковую интенсивность, что обеспечивается эрмитовым характером оператора U .

7.9. Стандартное рассмотрение (см., например, 7.8) приводит к соотношению вида

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{2}{\hbar} U_1(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (1)$$

где, как обычно,

$$\rho = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2\mu} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*).$$

Проинтегрировав уравнение (1) по произвольному объему, находим

$$\frac{d}{dt} \int_V |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = - \oint_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{s} + \frac{2}{\hbar} \int_V U_1(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV. \quad (2)$$

При $U_1 \equiv 0$ соотношение (2) представляет закон сохранения вероятности в том смысле, что изменение вероятности нахождения частицы в объеме V за единицу времени равно (со знаком минус) потоку вероятности через окружающую этот объем поверхность S . При $U_1 \neq 0$ второе слагаемое в правой части выражения (2) нарушает этот баланс и тем самым представляет дополнительный «механизм» изменения (со временем) вероятности, а тем самым и нормировки в.ф. состояния, что можно интерпретировать как изменение числа частиц в системе. Очевидно, что при $U_1 > 0$ этот дополнительный «механизм» увеличивает число частиц, а при $U_1 < 0$ — уменьшает, т. е. частицы поглощаются. Отметим, что интенсивность этих процессов (рождения и поглощения) в данной точке пространства пропорциональна плотности вероятности нахождения частиц $|\Psi|^2$.

7.10. Представив в.ф. в виде

$$\Psi(x, t=0) = \frac{A}{4} \left(3 \sin \frac{\pi x}{a} - \sin \frac{3\pi x}{a} \right)$$

и учитывая вид с.ф. и с.з. гамильтониана частицы (см. 2.1), находим согласно общей формуле, определяющей временную зависимость в.ф.,

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{A}{4} \left(3 \sin \frac{\pi x}{a} \exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2 t}{2\mu a^2}\right) - \sin \frac{3\pi x}{a} \exp\left(-\frac{9i\hbar\pi^2 t}{2\mu a^2}\right) \right) = \\ &= \frac{A}{4} \exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2 t}{2\mu a^2}\right) \left(3 \sin \frac{\pi x}{a} - \exp\left(-\frac{4i\hbar\pi^2 t}{\mu a^2}\right) \sin \frac{3\pi x}{a} \right). \end{aligned}$$

Через время $T = \mu a^2 / 2\pi\hbar$ частица возвращается в исходное состояние.

7.11. Учитывая результат задачи 4.1, легко находим

$$\Psi(\varphi, t) = \frac{A}{2} \left[1 - \exp\left(-\frac{2i\hbar t}{I}\right) \cos(2\varphi) \right].$$

Через время $T = \pi I / \hbar$ ротатор возвращается в исходное состояние.

7.12. Представив в.ф. в виде

$$\Psi(\theta, t=0) = A \cos^2 \theta = \frac{A}{3} [(3 \cos^2 \theta - 1) + 1] \quad (1)$$

и учитывая, что первое и второе слагаемые в квадратных скобках пропорциональны соответственно шаровым функциям Y_{20} и Y_{00} , являющимся с.ф. гамильтониана (см. 4.3), находим

$$\Psi(\theta, t) = \frac{A}{3} \left\{ 1 + (3 \cos^2 \theta - 1) \exp\left(-\frac{3i\hbar t}{I}\right) \right\}.$$

Через время $T = 2\pi/3\hbar$ ротатор возвращается в исходное состояние.

7.13. Разложим в. ф. по с. ф. оператора импульса (и гамильтониана):

$$\Psi(x, t=0) = \int c(p) \Psi_p(x) dp, \quad \Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right),$$

где

$$\begin{aligned} c(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x, t=0) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} + \frac{imv_0x}{\hbar} - \frac{ipx}{\hbar}\right] dx. \end{aligned} \quad (1)$$

Интеграл в выражении (1) просто сводится к интегралу Пуассона, и

$$c(p) = \frac{aA}{\sqrt{\hbar}} \exp\left[-\frac{1}{2\hbar^2} (mv_0a - pa)^2\right].$$

В. ф. $\Psi(x, t)$ состояния частицы в произвольный момент времени, согласно общим принципам, может быть найдена по формуле

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int c(p) \exp\left(-\frac{ip^2t}{2\hbar m}\right) \Psi_p(x) dp = \\ &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left[-\frac{ip^2t}{2m\hbar} + \frac{ipx}{\hbar} - \frac{a^2}{2\hbar^2} (mv_0 - p)^2\right] dp. \end{aligned} \quad (2)$$

Интеграл в выражении (2) аналогичен интегралу в формуле (1), и его вычисление дает после простых, но несколько громоздких преобразований

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= A \left[1 + \frac{i\hbar}{ma^2}\right]^{-1/2} \times \\ &\times \exp\left[\frac{-ma^2\hbar^2(x - v_0t)^2 + i\hbar^3x^2t + ia^4m^2v_0\hbar(2x - v_0t)}{2m(a^4\hbar^2 + t^2\hbar^4/m^2)}\right]. \end{aligned} \quad (3)$$

Согласно (3) имеем

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} \exp\left[-\frac{(x - v_0t)^2}{a^2 \left(1 + \frac{t^2 \hbar^2}{m^2 a^4}\right)}\right]. \quad (4)$$

Легко найти, что при $|A|^2 = (\pi a^2)^{-1/2}$ в. ф. $\Psi(x, t)$ является нормированной на единицу. Учитывая это обстоятельство, находим

$$\begin{aligned} \overline{x(t)} &= \int x |\Psi(x, t)|^2 dx = v_0t, \\ \overline{(\Delta x(t))^2} &= \overline{(x - x(t))^2} = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{t^2 \hbar^2}{m^2 a^4}\right). \end{aligned} \quad (5)$$

Функция

$$c(p, t) = \exp\left(-\frac{ip^2t}{2m\hbar}\right) c(p)$$

представляет в. ф. частицы в импульсном представлении, и, учитывая вид $c(p)$, находим

$$\overline{p(t)} = \int p |c(p, t)|^2 dp = mv_0, \quad \overline{(\Delta p(t))^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2}. \quad (6)$$

Полученные результаты (4)–(6) имеют простой смысл: функция распределения по координатам частицы согласно (4) имеет вид гауссовского пакета, центр которого $x(t)$ перемещается со скоростью v_0 (равной \bar{p}/m); при этом ширина пакета, имеющая порядок величины $\sqrt{(\Delta x(t))^2}$, увеличивается (пакет расплывается). Расплывание пакета связано с тем, что импульс частицы не имеет определенного значения.

Ширина пакета увеличивается вдвое за время t_0 , равное

$$t_0 = \sqrt{3} ma^2/\hbar. \quad (7)$$

Приведем численную оценку времени t_0 .

1. Для частицы с массой $m = 10^{-27}$ г (электрон) при $a = 10^{-8}$ см (атомные размеры) находим согласно (7) $t_0 \sim 10^{-16}$ с.

2. Для макроскопической частицы ($m = 10^{-3}$ г, $a = 10^{-3}$ см) формула (7) дает $t_0 \sim 10^{18}$ с $\sim 10^{11}$ лет!

7.14. Согласно предыдущей задаче

$$\overline{(\Delta x(t))^2} = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{t^2 \hbar^2}{m^2 a^4} \right) \equiv \frac{a^2(t)}{2}. \quad (1)$$

Из выражения (1) следует

$$[a^2(t)]_{\min} = t\hbar/m, \text{ т.е. } a^2(t) \geq t\hbar/m.$$

7.15. В. ф. состояния частицы в произвольный момент времени:

$$\Psi(x, t) = \int C(E) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \Psi_E(x) dE, \quad (1)$$

и убывание величины $|\Psi(x, t)|^2$ при $t \rightarrow \infty$ представляется очевидным ввиду быстрой осцилляции подинтегральной функции (точнее, осцилляции ее вещественной и мнимой частей) в выражении (1).

Отмеченное условие убывания $|\Psi(x, t)|^2$ с учетом сохранения нормировки в. ф. означает, что частица при $t \rightarrow \infty$ уходит на бесконечно большое расстояние. Этот результат соответствует инфинитному характеру движения частицы в классической механике.

7.16. Разложив функцию $\Psi(x, t=0)$ по с. ф. гамильтониана частицы в поле $U(x) = -\alpha\delta(x)$, представим в. ф. $\Psi(x, t)$ в виде

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar}\right) C_0 \Psi_0(x) + \int_0^\infty C(E) e^{-iEt/\hbar} \Psi_E(x) dE, \quad (1)$$

где

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0} \exp(-\kappa_0 |x|), \quad E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m}, \quad \kappa_0 = \frac{ma}{\hbar^2}$$

представляют нормированную в. ф. и энергию единственного состояния д. с. в рассматриваемом поле (см. 2.11).

Второе слагаемое в выражении (1) (вклад непрерывного спектра в в. ф.) при $t \rightarrow \infty$ обращается в нуль из-за быстрой осцилляции вещественной и мнимой частей подынтегральной функции. Таким образом, имеем

$$|\Psi(x, t = \infty)|^2 = |C_0 \Psi_0(x)|^2 = \kappa_0 |C_0|^2 \exp(-2\kappa_0 |x|). \quad (2)$$

Выбрав значение коэффициента A в в. ф. $\Psi(x, t = 0)$ из условия нормировки: $A^2 = \beta$ — и вычислив величину

$$C_0 = \int \Psi(x, t = 0) \Psi_0^*(x) dx = 2\sqrt{\kappa_0 \beta} (\kappa_0 + \beta)^{-1},$$

перепишем выражение (2) в виде

$$W(x, t = \infty) \equiv |\Psi(x, t = \infty)|^2 = \frac{4\beta \kappa_0^2}{(\kappa_0 + \beta)^2} \exp(-2\kappa_0 |x|),$$

в котором оно представляет функцию распределения по координатам частицы при $t \rightarrow \infty$. Условие нормировки этой функции имеет вид

$$w \equiv \int_{-\infty}^{\infty} W(x, t = \infty) dx = 4\beta \kappa_0 (\kappa_0 + \beta)^{-2} \leq 1.$$

Тот факт, что функция W нормирована на значение, меньшее единицы, означает, что частица с конечной вероятностью, равной $(1 - w)$, уходит на бесконечно большое расстояние от силового центра. Для понимания результата задачи следует иметь в виду неравенство

$$\begin{aligned} \int |\Psi(x, t = \infty)|^2 dx &= \int \lim_{t \rightarrow \infty} |\Psi(x, t)|^2 dx \neq \\ &\neq \lim_{t \rightarrow \infty} \int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \end{aligned}$$

7.17. В. ф. $\Psi(x, t)$ имеет вид

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2 t}{2m} - px\right)\right] \Phi_0(p) dp. \quad (1)$$

При $t \rightarrow \infty$ (и $x \rightarrow \pm\infty$) фаза в показателе экспоненты в выражении (1) сильно изменяется уже при небольшом изменении переменной p , что приводит к быстрым осцилляциям вещественной и мнимой частей подынтегральной функции и к взаимному уничтожению вкладов от различных областей интегрирования.

Наименее скомпенсированным (а поэтому и доминирующим) является вклад тех областей интегрирования, в которых показатель экспоненты изменяется наиболее медленно, т. е. областей, близких к экстремальным точкам этого показателя как функции переменной p , определяемым из условия

$$\frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{p^2 t}{2m} - px \right) = 0, \quad p_0 = \frac{mx}{t}.$$

Вынося из-под знака интеграла значение функции $\Phi_0(p_0)$ в экстремальной точке и вычисляя получающийся при этом интеграл, находим искомый асимптотический вид в. ф. при $t \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &\approx \frac{\Phi_0(mx/t)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2 t}{2m} - px \right) \right] dp = \\ &= \sqrt{\frac{m}{it}} \Phi_0 \left(\frac{mx}{t} \right) e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Отметим наглядный смысл результата (2): значение в. ф. при $t \rightarrow \infty$ в точке $x \rightarrow \pm\infty$ (так, что $x/t = \text{const} \equiv v_0 = p_0/m$) определяется в. ф. $\Phi_0(p_0)$ в импульсном представлении — именно такой импульс p_0 должна иметь свободная частица в классической механике, чтобы за время t сместиться на расстояние x .

7.18. Разложив в. ф. по с. ф. гармонического осциллятора, имеем

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \exp(-iE_n t/\hbar) \Psi_n(x), \quad (1)$$

где

$$\Psi_n(x) = (2^n n! a \sqrt{\pi})^{-1/2} \exp(-x^2/2a^2) H_n(x/a),$$

$$\begin{aligned} C_n &= \int \Psi(x, t=0) \Psi_n^*(x) dx = \\ &= (2^n n! \pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x/a) \exp \left[-\frac{x^2}{2a^2} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2} + \frac{ip_0 x}{\hbar} \right] \frac{dx}{a} \end{aligned} \quad (2)$$

(мы выбрали $A = (a\sqrt{\pi})^{-1/2}$ из условия нормировки в. ф.).

Для вычисления C_n воспользуемся производящей функцией полиномов Эрмита

$$\exp(-z^2 + 2\xi z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) z^n. \quad (3)$$

Умножим обе части соотношения (3) на $\exp \left[-\xi^2 + \frac{\xi x_0}{a} + \frac{i\xi p_0 a}{\hbar} \right]$ и проинтегрируем по ξ . При этом в правой части коэффициент при z^n очевидным образом выражается через C_n .

Интеграл от левой части преобразуем следующим образом:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-z^2 - \xi^2 + 2\xi z + \xi x_0/a + ip_0 a \xi/\hbar] d\xi = \\ & = \sqrt{\pi} \exp\left[\frac{1}{4}\left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^2\right] \exp\left[z\left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)\right] = \\ & = \sqrt{\pi} \exp\left[\frac{1}{4}\left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^2\right] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^n z^n. \end{aligned}$$

Приравнивая коэффициенты при z^n в соотношении, получаемся в результате интегрирования обеих частей равенства (3), находим

$$C_n = (2^n n!)^{-1/2} \left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^n \exp\left[-\frac{x_0^2}{4a^2} + \frac{ip_0 x_0}{2\hbar} - \frac{p_0^2 a^2}{4\hbar^2}\right].$$

Учитывая, что $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ и найденное значение C_n , перепишем соотношение (1) в виде

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^2}} \sum \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^n H_n(x/a) \times \\ & \times \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} - \frac{x_0^2}{4a^2} - \frac{p_0^2 a^2}{4\hbar^2} + \frac{ip_0 x_0}{2\hbar} - i\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)t\right]. \quad (4) \end{aligned}$$

С помощью формулы (3) ряд (4) легко просуммировать:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= (\pi a^2)^{-1/4} \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} - \frac{x_0^2}{4a^2} - \frac{p_0^2 a^2}{4\hbar^2} + \frac{ip_0 x_0}{2\hbar}\right] \times \\ & \times \exp\left[-\frac{1}{4}\left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^2 e^{-2i\omega t} + \left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right) \frac{x}{a} e^{-i\omega t} - \frac{i\omega t}{2}\right]. \end{aligned}$$

Последнее выражение удобно записать в виде

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= (\pi a^2)^{-1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a} - \frac{x_0}{a} \cos \omega t - \frac{p_0 a}{\hbar} \sin \omega t\right)^2 + \right. \\ & \left. + \frac{ix}{a} \left(\frac{p_0 a}{\hbar} \cos \omega t - \frac{x_0}{a} \sin \omega t\right) + \frac{ip_0 x_0}{\hbar} \sin^2 \omega t + \right. \\ & \left. + \frac{ix_0^2}{4a^2} \sin 2\omega t - \frac{ip_0^2 a^2}{4\hbar^2} \sin 2\omega t - \frac{i\omega t}{2}\right]. \quad (5) \end{aligned}$$

Из (5) следует (напомним, что $a^2 = \hbar/m\omega$)

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{1}{a^2}\left(x - x_0 \cos \omega t - \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t\right)^2\right], \quad (6)$$

т.е. распределение по координатам частицы имеет вид гауссовского пакета, центр которого $\bar{x}(t)$ перемещается со временем по закону

$$x_0(t) \equiv \bar{x}(t) = x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t$$

(осциллирует с частотой ω), а ширина остается неизменной (отсутствует распыление пакета) и равна $\overline{(\Delta x(t))^2} = a^2/2$.

Учитывая вид в. ф. (5), находим характеристики распределения осциллятора по импульсам:

$$\overline{p(t)} = p_0 \cos \omega t - m\omega x_0 \sin \omega t, \quad \overline{(\Delta p(t))^2} = \hbar^2/2a^2 = \text{const.}$$

Отметим, что величины $\overline{x(t)}$ и $\overline{p(t)}$ изменяются со временем так же, как координата и импульс классического осциллятора.

Читателю предлагается самостоятельно обсудить вопрос о вероятностях возбуждения различных стационарных состояний осциллятора в состоянии, рассмотренном в данной задаче (т. е. исследовать величину $\omega_n = |C_n|^2$).

7.19. Так как временная функция Грина удовлетворяет у. Ш. по переменным x, t , она может быть представлена в виде

$$G(x, t; x', t') = \int \exp\left[-\frac{ip^2}{2m\hbar}(t-t')\right] C_p(x', t') \Psi_p(x) dp, \quad (1)$$

где $\Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipx/\hbar)$ — с. ф. оператора импульса и гамильтониана свободных частиц.

Коэффициенты $C_p(x', t')$ в разложении (1) определяются из условия обращения функции Грина при $t=t'$ в δ -функцию: $\delta(x-x')$. Из соотношения (1) при $t=t'$ и равенства

$$\int \Psi_p^*(x') \Psi_p(x) dp = \delta(x-x')$$

следует

$$C_p = \Psi_p^*(x'). \quad (2)$$

Согласно (1) и (2) находим искомый вид функции Грина:

$$\begin{aligned} G(x, t; x', t') &= \int \exp\left[-\frac{ip^2}{2m\hbar}(t-t')\right] \Psi_p^*(x') \Psi_p(x) dp = \\ &= (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2(t-t')}{2m} + px' - px\right)\right] dp = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t')}} \exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right]. \quad (3) \end{aligned}$$

Обобщение формулы (3) на трехмерный случай представляется очевидным:

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

С помощью временной функции Грина в. ф. $\Psi(x, t)$ частицы по известной в. ф. $\Psi(x, t=0)$ можно найти по формуле

$$\Psi(x, t) = \int G(x, t; x', 0) \Psi(x', t=0) dx'.$$

Отметим, что зависимость функции Грина от координат и времени в виде $(x-x')$ и $(t-t')$ связана с однородностью

пространства и времени для свободных частиц.

$$7.20. G(\mathbf{p}, t; \mathbf{p}', t') = \exp\left[-\frac{i\mathbf{p}^2(t-t')}{2m\hbar}\right] \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

7.21. Функция Грина отлична от нуля при $x, x' < 0$. По переменным x, t она удовлетворяет у. Ш. для свободной частицы и граничному условию $G(x=0; t; x', t') = 0$.

Учитывая результат задачи 7.19, легко сообразить, что искомая функция Грина имеет вид

$$G(x, t; x', t') = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t')}} \left\{ \exp\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')} - \exp\frac{im(x+x')^2}{2\hbar(t-t')} \right\}.$$

7.22. Подставив в формулу

$$\Psi(x, t) = \int G(x, t; x', t'=0) \Psi(x', t=0) dx' \quad (1)$$

значение в. ф. $\Psi(x, 0)$, указанное в условии задачи, и функцию Грина, найденную в предыдущей задаче, и вычисляя получающиеся при этом интегралы, находим вид в. ф.:

$$\Psi(x, t) = A \sqrt{\frac{ma^2}{ma^2 + i\hbar t}} \left\{ \exp\left[\frac{1}{2(1 + \hbar^2 t^2/m^2 a^4)} \frac{1}{a^2} \left(- (x + x_0 - \frac{p_0 t}{m})^2 + \frac{i\hbar t}{ma^2} (x + x_0)^2 + \frac{2ip_0 a^2}{\hbar} (x + x_0) - \frac{itp_0^2 a^2}{m\hbar} - \frac{2ip_0 x_0}{\hbar} \left(a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}\right)\right)\right] - \exp[(x \rightarrow -x)] \right\} \quad (2)$$

где $\exp[(x \rightarrow -x)]$ означает выражение, совершенно аналогичное первому экспоненциальному слагаемому в формуле (2) с единственной заменой x на $(-x)$.

В. ф. (2) представляет суперпозицию двух волновых пакетов, первый из которых описывает частицы, падающие на стенку, а второй — отраженные. В начальные моменты времени в выражении (2) наиболее существенным является первое слагаемое, описывающее падающие частицы. При $t > \frac{mx_0}{p_0}$ в случае $p_0 \gg \frac{\hbar}{a}$ *, наоборот, доминирующим является второе слагаемое, описывающее отраженные частицы.

*) Отметим, что именно в случае $p_0 \gg \hbar/a$ и имеет смысл характеризовать исходный волновой пакет как описывающий частицу, падающую на стенку. В противном случае ($p_0 \leq \hbar/a$) уже в исходном состоянии частица с заметной вероятностью (~ 1) имеет отрицательное значение импульса $p < 0$ (сравнить с 1.42), как и отраженная частица; соответственно характеризовать первое слагаемое в фигурных скобках выражения (2) как отвечающее падающим на стенку частицам буквально — лишено смысла. Отмеченное различие между случаями $p_0 \gg \hbar/a$ и $p_0 \leq \hbar/a$ проявляется в том, что при $p_0 \leq \hbar/a$ первое слагаемое в (2) не является пренебрежимо малым по сравнению со вторым даже при $t \rightarrow \infty$.

7.23. Функция Грина в импульсном представлении имеет вид

$$G(p, t; p', t') = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{iE(t-t')}{\hbar}\right] \Phi_E^*(p') \Phi_E(p) dE, \quad (1)$$

где $\Phi_E(p) = (2\pi F_0 \hbar)^{-1/2} \exp\left[-\frac{ip^3}{6m\hbar F_0} + \frac{iEp}{\hbar F_0}\right]$ представляет с. ф. гамильтониана частицы (см. 2.45).

Вычисление интеграла в выражении (1) дает

$$G(p, t; p', t') = \exp\left[-\frac{i(p^3 - (p')^3)}{6m\hbar F_0}\right] \delta(p - p' - F_0(t - t')).$$

7.24. Учитывая соотношение между функциями Грина в координатном и импульсном представлениях

$$G(x, t; x', t') = (2\pi\hbar)^{-1} \int \exp\left[\frac{i(px - p'x')}{\hbar}\right] G(p, t; p', t') dp' dp$$

и явный вид функции $G(p, t; p', t')$, найденный в предыдущей задаче, легко получаем

$$G(x, t; x', t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t')}} \exp\left\{-\frac{iF_0^2(t-t')^3}{24m\hbar} + \frac{iF_0}{2\hbar}(t-t')(x+x') + \frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right\}.$$

Движение волнового пакета читателю предлагается рассмотреть самостоятельно. Отметим лишь, что плотность вероятности $|\Psi(x, t)|^2$ имеет вид распределения Гаусса, причем

$$\overline{x(t)} = x_0 + p_0 t/m + F_0 t^2/2m, \quad (\Delta x(t))^2 = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}\right).$$

7.25. Для нахождения функции Грина следует вычислить сумму

$$G(x, t; x', t') = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[\frac{-iE_n(t-t')}{\hbar}\right] \Psi_n^*(x') \Psi_n(x), \quad (1)$$

где $\Psi_n(x) = (2^n a \sqrt{\pi} n!)^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) H_n\left(\frac{x}{a}\right)$,

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega}.$$

Учитывая известную из теории полиномов Эрмита формулу (см. [12])

$$(1-t^2)^{-1/2} \exp\left[\frac{2xyt - (x^2 + y^2)t^2}{1-t^2}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x) H_n(y)}{2^n n!} t^n,$$

легко вычислить сумму (1) и найти явный вид функции Грина

$$G(x, t; x', t') = \frac{\exp\left[\frac{2xx' - (x^2 + (x')^2) \cos \omega(t - t')}{2ia^2 \sin \omega(t - t')}\right]}{\sqrt{2\pi ia^2 \sin \omega(t - t')}}.$$

7.26. Пусть система K' движется со скоростью V вдоль оси x по отношению к системе K , так что $x = x' + Vt$, $t = t'$.

Потенциальные энергии в этих двух системах связаны соотношением $U'(x', t') \equiv U'(x - Vt, t) = U(x, t)$ (мы ограничиваемся для простоты случаем одномерного движения, обобщение на трехмерный случай представляется очевидным).

Унитарный оператор U^* , соответствующий преобразованию Галилея, находится из того условия, что если в. ф. $\Psi(x, t)$ удовлетворяет у. Ш. (в системе K)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H}\Psi = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x, t)\right] \Psi(x, t), \quad (1)$$

то функция

$$\Psi'(x', t) = \hat{U}\Psi(x, t) \quad (2)$$

является решением у. Ш. в системе K' (и наоборот)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(x', t) = \hat{H}'\Psi' = \left[\frac{\hat{p}'^2}{2m} + U'(x', t)\right] \Psi'(x', t). \quad (3)$$

Так как обе функции Ψ , Ψ' описывают одно и то же физическое состояние частицы (только в различных системах координат), то должно быть выполнено условие

$$|\Psi'(x', t)|^2 \equiv |\Psi'(x - Vt, t)|^2 = |\Psi(x, t)|^2, \quad (4)$$

выражающее независимость от выбора системы отсчета плотности вероятности нахождения частицы в данной точке пространства. Из равенства (4) вытекает, что оператор U в соотношении (2) имеет вид

$$\hat{U} = \exp\{iS(x, t)\}, \quad (5)$$

где $S(x, t)$ — вещественная функция. Подставив

$$\Psi'(x', t) = \exp\{iS(x, t)\} \Psi(x, t) \quad (6)$$

в уравнение (3) и переходя в нем к новым переменным (x, t) , получим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + i\hbar \left(-\frac{\hbar}{m} \frac{\partial S}{\partial x} - V\right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \left[U(x, t) - \frac{i\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \hbar V \frac{\partial S}{\partial x} + \hbar \frac{\partial S}{\partial t}\right] \Psi(x, t). \quad (7)$$

Потребовав, чтобы уравнение (7) было тождественно (1), получаем систему уравнений для определения вида

*) Не путать с $U(x, t)$.

функции $S(x, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{m} \frac{\partial S}{\partial x} + V &= 0, \\ -\frac{i\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \hbar V \frac{\partial S}{\partial x} + \hbar \frac{\partial S}{\partial t} &= 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Из первого уравнения (8) следует

$$S(x, t) = -\frac{mVx}{\hbar} + f(t),$$

а второе уравнение позволяет найти $f(t)$, так что

$$S(x, t) = -\frac{mVx}{\hbar} + \frac{mV^2t}{2\hbar} + C. \quad (9)$$

Выражение (9) (в котором можно опустить несущественную постоянную C), согласно формуле (5), определяет вид искомого унитарного оператора.

Учитывая соотношения (6) и (9), легко установить следующий закон преобразования в.ф. частицы в импульсном представлении при преобразовании Галилея:

$$\Phi'(p', t) = \Phi(p = p' + mV, t) \exp\left(-\frac{imV^2t}{2\hbar} + \frac{ipVt}{\hbar}\right), \quad (10)$$

из которого вытекает соотношение $\omega'(p - mV, t) = \omega(p, t)$ между функциями распределения по импульсам частицы в системах K' и K .

7.27. Пусть в.ф. $\Psi(\mathbf{r}, t)$ является решением у.Ш.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 \Psi + e\varphi(\mathbf{r}, t) \Psi \quad (1)$$

при некоторой калибровке $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, $\varphi(\mathbf{r}, t)$ потенциалов внешнего электромагнитного поля, в котором движется заряженная частица.

Инвариантность у.Ш. относительно калибровочного преобразования потенциалов означает, что если перейти к новой калибровке потенциалов

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f(\mathbf{r}, t), \quad \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}(\mathbf{r}, t),$$

то должен существовать такой унитарный оператор \mathcal{U} , что в.ф. $\Psi' = \mathcal{U}\Psi$, описывающая то же самое физическое состояние частицы, что и в.ф. Ψ (но только в новой калибровке), и потому удовлетворяющая соотношению

$$|\Psi'(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (2)$$

является решением у.Ш.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \Psi' + e\varphi' \Psi', \quad (3)$$

Для нахождения оператора \hat{U} замечаем, что согласно (2) он должен иметь вид

$$\hat{U} = \exp \{iS(\mathbf{r}, t)\}, \quad (4)$$

где $S(\mathbf{r}, t)$ — вещественная функция. Подставив в. ф. вида

$$\Psi'(\mathbf{r}, t) = \exp \{iS(\mathbf{r}, t)\} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

в уравнение (3) и потребовав, чтобы получающееся при этом уравнение для в. ф. Ψ имело вид (1), находим уравнения для определения функции $S(\mathbf{r}, t)$ (сравнить с решением предыдущей задачи):

$$\hbar \nabla S(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{c} \nabla f(\mathbf{r}, t), \quad \hbar \frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, t). \quad (6)$$

Решение системы уравнений (6) дает

$$S(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{\hbar c} f(\mathbf{r}, t) + C \quad (7)$$

и тем самым, согласно (4), определяет вид искомого унитарного оператора (несущественную постоянную C в выражении (7) можно опустить).

Очевидно обобщение на случай системы произвольного числа заряженных частиц:

$$\hat{U} = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar c} \sum_a e_a f(\mathbf{r}_a, t) \right\},$$

где сумма берется по всем заряженным частицам.

7.28. При унитарных преобразованиях (в том числе и зависящих явно от времени) в. ф. и операторы физических величин преобразуются, как известно, следующим образом:

$$\Psi \rightarrow \Psi' = \hat{U}\Psi, \quad \hat{f} \rightarrow \hat{f}' = \hat{U}\hat{f}\hat{U}^+.$$

В частности,

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^+. \quad (1)$$

Выясним, какой вид принимает у. Ш. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}\Psi$ при унитарном преобразовании $\hat{U}(t)$, зависящем явно от времени. Из у. Ш. для в. ф. Ψ следует

$$i\hbar \hat{U} \frac{\partial}{\partial t} \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{U}\Psi) - i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \Psi = \hat{U}\hat{H}\Psi. \quad (2)$$

Учитывая, что $\hat{U}^+ \hat{U} = 1$, $\Psi' = \hat{U}\Psi$, перепишем (2) в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi' = \left\{ \hat{U}\hat{H}\hat{U}^+ + i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \hat{U}^+ \right\} \Psi', \quad (3)$$

представляющем у. Ш. с гамильтонианом \hat{H}'' , равным

$$\hat{H}'' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^+ + i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \hat{U}^+ = \hat{H}' + i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \right) \hat{U}^+ \quad (4)$$

(легко убедиться, что оператор \hat{H}'' эрмитов). Выражение (4) решает поставленную задачу.

Таким образом, при унитарном преобразовании $U(t)$ в соответствие гамильтониану \hat{H} можно поставить два оператора: \hat{H}' и \hat{H}'' . Для понимания полученного результата и выяснения роли операторов \hat{H}' , \hat{H}'' необходимо иметь в виду следующее обстоятельство.

Гамильтониан \hat{H} выполняет, вообще говоря, две функции:

1) он определяет временную эволюцию в.ф. системы в соответствии с у. Ш.;

2) в случае, если оператор \hat{H} не зависит явно от времени, он является интегралом движения, а его с.з. имеют непосредственный физический смысл, представляя энергетические уровни системы.

Однако если $\hat{H}(t)$ зависит явно от времени, то он утрачивает вторую функцию (энергия не сохраняется; с.з. же мгновенного гамильтониана $\hat{H}(t)$ для рассматриваемой системы не имеют, вообще говоря, глубокого физического смысла).

Если исходный гамильтониан \hat{H} не зависит от времени и тем самым выполняет обе указанные выше функции, то при зависящем явно от времени унитарном преобразовании эти функции распределяются между операторами \hat{H}' и \hat{H}'' : оператор \hat{H}'' определяет временную эволюцию в.ф., а \hat{H}' принимает на себя вторую функцию оператора \hat{H} как оператора сохраняющейся величины. Очевидно, спектры с.з. \hat{H} и \hat{H}' совпадают. При этом то обстоятельство, что оператор \hat{H}' является интегралом движения, можно подтвердить и непосредственным вычислением:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}' \equiv \frac{\partial}{\partial t} \hat{H}' + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}'', \hat{H}'] = 0.$$

Если же гамильтониан $\hat{H}(t)$ зависит от времени, то он утрачивает свою функцию интеграла движения. Соответственно в этом случае оператор \hat{H}' не имеет непосредственного физического смысла, а оператор \hat{H}'' по-прежнему является оператором, определяющим временную эволюцию в.ф. системы.

Иллюстрацией проведенного рассмотрения является переход к гайзенберговскому представлению, осуществляемый унитарным оператором (в случае $\frac{\partial}{\partial t} \hat{H} = 0$):

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

В этом случае $\hat{H}' = \hat{H}$, $\hat{H}'' = 0$ и из у. Ш в новом, гайзенберговском представлении следует независимость в.ф. от времени.

Имея в виду, что унитарные преобразования в квантовой механике являются аналогом канонических преобразований в классической механике, нетрудно сообразить, что соотношение

(4) является квантовомеханическим обобщением формулы

$$H''(P, Q, t) = H(P, Q, t) + \frac{\partial f}{\partial t}$$

классической механики, выражающей преобразование функции Гамильтона при каноническом преобразовании, осуществляемом производящей функцией $f(t)$, зависящей явно от времени [4].

7.29. а) Для нахождения вида гайзенберговских операторов

$$\hat{x}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{x} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}, \quad \hat{p}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{p} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}, \quad \hat{H} = \hat{p}^2/2m,$$

воспользуемся импульсным представлением, в котором, как известно,

$$\hat{p} = p, \quad \hat{x} = i\hbar \partial/\partial p.$$

Тогда легко находим

$$\hat{p}(t) = p = \hat{p},$$

$$\hat{x}(t) = \exp\left(\frac{ip^2t}{2m\hbar}\right) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \exp\left(-\frac{ip^2t}{2m\hbar}\right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} + \frac{pt}{m} = \hat{x} + \frac{t}{m} \hat{p},$$

т. е. соотношения между операторами точно такие же, как между соответствующими классическими величинами, причем операторы \hat{x} , \hat{p} играют роль начальных условий для операторов $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$.

б) В гайзенберговском представлении операторы $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$ зависят явно от времени и уравнения движения для них имеют вид

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}(t)], \quad \frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}(t)], \quad (1)$$

где производные d/dt понимаются как производные по времени, явно входящему в гайзенберговские операторы; гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}(\hat{p}(t), \hat{x}(t))$ выражается через операторы $\hat{p}(t)$, $\hat{x}(t)$, удовлетворяющие каноническому коммутационному соотношению

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

Для свободной частицы $\hat{H} = \hat{p}^2(t)/2m$ и уравнения (1) принимают вид

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{\hat{p}(t)}{m}, \quad \frac{d\hat{p}(t)}{dt} = 0. \quad (2)$$

Из уравнений (2) имеем

$$\hat{p}(t) = \hat{p}_0 = \hat{p}, \quad (3)$$

т. е. оператор $\hat{p}(t)$ не зависит явно от времени. При $t=0$ гайзенберговские операторы совпадают с операторами в шредингеровском представлении, поэтому $\hat{p}_0 \equiv \hat{p}$ — обычный оператор импульса в шредингеровском представлении.

Из первого уравнения (2) с учетом (3) легко находим

$$\hat{x}(t) = \frac{t}{m} \hat{p}_0 + \hat{x}_0 = \frac{t}{m} \hat{p} + \hat{x},$$

где $\hat{x}_0 \equiv \hat{x}$ — оператор координаты в шредингеровском представлении.

7.30. а) Учитывая вид гамильтониана $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - F_0 \hat{x}$, операторы $\hat{x}(t)$ и $\hat{p}(t)$ легко найти, используя результат задачи 1.14:

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \exp(i\hat{H}t/\hbar) \hat{x} \exp(-i\hat{H}t/\hbar) = \hat{x} + \frac{t}{m} \hat{p} + \frac{F_0 t^2}{2m}, \\ \hat{p}(t) &= \hat{p} + \frac{F_0 t}{m}. \end{aligned} \quad (1)$$

б) Учитывая формулы

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2(t)}{2m} - F_0 \hat{x}(t), \quad [\hat{p}(t), \hat{x}(t)] = -i\hbar,$$

находим уравнения движения для гайзенберговских операторов

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{x}(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{x}(t)] = \frac{\hat{p}(t)}{m}, \\ \frac{d\hat{p}(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{p}(t)] = F_0, \end{aligned} \quad (2)$$

решение которых приводит к установленному выше виду (1) этих операторов (напомним, что \hat{x} , \hat{p} — операторы в шредингеровском представлении, играющие роль начальных условий для гайзенберговских операторов $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$).

7.31. а) Учитывая, что для осциллятора

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2}, \quad \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{\hat{p}}{m}, \quad \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}] = -k\hat{x},$$

легко находим, воспользовавшись результатом задачи 1.14:

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \exp(i\hat{H}t/\hbar) \hat{x} \exp(-i\hat{H}t/\hbar) = \\ &= \hat{x} + \frac{1}{1!} \frac{it}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] + \frac{1}{2!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^2 [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{x}]] + \dots = \\ &= \hat{x} + \frac{1}{1!} t\hat{p}/m - \frac{1}{2!} t^2 \frac{k}{m} \hat{x} - \frac{1}{3!} t^3 \frac{k}{m^2} \hat{p} + \dots = \\ &= \hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin \omega t, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\hat{p}(t) = \hat{p} \cos \omega t - m\omega \hat{x} \sin \omega t.$$

б) Уравнения движения для гайзенберговских операторов имеют вид .

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{x}(t)] = \frac{\hat{p}(t)}{m}, \quad \frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{p}(t)] = -k\hat{x}(t).$$

Эту систему уравнений для операторов $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$ в силу ее линейности можно решать так же, как для обычных (неоператорных) функций, так как при этом не возникает трудностей, связанных с некоммутативностью операторов. Решение имеет вид

$$\hat{x}(t) = \hat{C}_1 \cos \omega t + \hat{C}_2 \sin \omega t, \quad \hat{p}(t) = -m\omega [\hat{C}_1 \sin \omega t - \hat{C}_2 \cos \omega t],$$

где \hat{C}_1 и \hat{C}_2 — не зависящие от времени операторы, вид которых находится из совпадения при $t=0$ гайзенберговских операторов с операторами \hat{x} , \hat{p} в шредингеровском представлении:

$$\hat{C}_1 = \hat{x}(0) = \hat{x}, \quad m\omega \hat{C}_2 = \hat{p}(0) = \hat{p}.$$

7.32. Задача решается аналогично предыдущей. Приведем ответ ($\omega = e\mathcal{H}_0/mc$):

$$\hat{x}(t) = \hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}_x}{m\omega} \sin \omega t + \frac{\hat{p}_y}{m\omega} (1 - \cos \omega t),$$

$$\hat{p}_x(t) = \hat{p}_x \cos \omega t + \hat{p}_y \sin \omega t - m\omega \hat{x} \sin \omega t,$$

$$\hat{y}(t) = \hat{y} - \hat{x} \sin \omega t + \frac{\hat{p}_x}{m\omega} (\cos \omega t - 1) + \frac{\hat{p}_y}{m\omega} \sin \omega t,$$

$$\hat{p}_y(t) = \hat{p}_y, \quad \hat{z}(t) = \hat{z} + t\hat{p}_z/m, \quad \hat{p}_z(t) = \hat{p}_z.$$

Оператор скорости частицы $\hat{v}(t) = d\hat{r}(t)/dt$ находится непосредственным дифференцированием по времени оператора $\hat{r}(t)$.

Читателю предлагается самостоятельно рассмотреть соотношения между операторами $\hat{r}(t)$, $\hat{v}(t)$ и $\hat{r}(0) = \hat{r}$, $\hat{v}(0) = \hat{v}$ и на основании полученных соотношений обсудить задачу 6.3.

7.33. Используя уравнения движения для гайзенберговских операторов $\hat{r}(t)$, $\hat{p}(t)$, находим после несложных преобразований

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [\hat{p}_i(t), \hat{x}_k(t)] &= [\dot{\hat{p}}_i(t), \hat{x}_k(t)] + [\hat{p}_i(t), \dot{\hat{x}}_k(t)] = \\ &= \frac{i}{\hbar} \{ [[\hat{H}(t), \hat{p}_i(t)], \hat{x}_k(t)] + [\hat{p}_i(t), [\hat{H}(t), \hat{x}_k(t)]] \} = 0, \end{aligned}$$

т. е. значение коммутатора $[\hat{p}_i(t), \hat{x}_k(t)]$ не зависит от времени, и так как при $t=0$ оно равно $[\hat{p}_i(0), \hat{x}_k(0)] = [\hat{p}_i, \hat{x}_k] = -i\hbar\delta_{ik}$, то доказана совместность канонических коммутационных соотношений для гайзенберговских операторов с уравнениями движения.

7.34. Используя вид операторов $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$, установленный в 7.29—31, легко находим:

$$a) [\hat{p}(t), \hat{x}(t')] = -i\hbar; \quad б) [\hat{p}(t), \hat{x}(t')] = -i\hbar;$$

$$в) [\hat{p}(t), \hat{x}(t')] = -i\hbar \cos \omega(t - t').$$

7.35. Подставив в гамильтонианы указанных систем $\hat{H}(t) \equiv \hat{H}(\hat{p}(t), \hat{x}(t))$ явное выражение для операторов $\hat{p}(t)$ и $\hat{x}(t)$, убеждаемся в том, что $\hat{H}(t) = \hat{H}(0)$.

Последний результат очевиден и в общем случае*), так как

$$\hat{H}(t) = \exp(i\hat{H}(0)t/\hbar) \hat{H}(0) \exp(-i\hat{H}(0)t/\hbar) = \hat{H}(0).$$

7.36. В гайзенберговском представлении в. ф. состояния системы не зависит явно от времени и временная зависимость средних значений физических величин полностью определяется зависимостью от времени соответствующих гайзенберговских операторов.

Учитывая значения следующих средних в состоянии, указанном в условии задачи (в. ф. нормирована на единицу при $\Lambda = (\sqrt{\pi a})^{-1/2}$):

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int |\Psi(x)|^2 x dx = x_0, & \overline{x^2} &= x_0^2 + a^2/2, \\ \bar{p} &= -i\hbar \int \Psi^*(x) \frac{d}{dx} \Psi(x) dx = p_0, & \overline{p^2} &= p_0^2 + \hbar^2/2a^2, \\ \overline{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}} &= -i\hbar \int \Psi^*(x) \left(x \frac{d}{dx} + \frac{d}{dx} x \right) \Psi(x) dx = 2x_0p_0, \end{aligned}$$

и используя вид гайзенберговских операторов рассматриваемых систем, установленный в 7.29—7.31, легко находим:

$$\begin{aligned} \text{а) } \overline{x(t)} &\equiv \bar{x}(t) = x_0 + tp_0/m, & \overline{(\Delta x(t))^2} &= \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right), \\ \overline{p(t)} &= p_0, & \overline{(\Delta p(t))^2} &= \hbar^2/2a^2; \\ \text{б) } \overline{x(t)} &= x_0 + tp_0/m + t^2 F_0/2m, & \overline{p(t)} &= p_0 + F_0 t/m, & \overline{(\Delta x(t))^2} &= \\ &= \overline{\hat{x}^2(t)} - (\overline{\hat{x}(t)})^2 = \frac{a^2}{2} \left(1 + \hbar^2 t^2/m^2 a^4 \right), & \overline{(\Delta p(t))^2} &= \hbar^2/2a^2; \\ \text{в) } \overline{x(t)} &= x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t, & \overline{p(t)} &= p_0 \cos \omega t - m\omega x_0 \sin \omega t, \\ \overline{(\Delta x(t))^2} &= \frac{a^2}{2} \left(\cos^2 \omega t + \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2 a^4} \sin^2 \omega t \right), & \overline{(\Delta p(t))^2} &= \frac{\hbar^2}{2a^2} \left(\cos^2 \omega t + \right. \\ &+ \left. \frac{m^2 \omega^2 a^4}{\hbar^2} \sin^2 \omega t \right) \end{aligned}$$

(отметим, что в случае осциллятора при $a^2 = \hbar/m\omega$ флуктуации координаты и импульса оказываются не зависящими от времени).

7.37. Снабжая индексом int операторы и в. ф. в представлении взаимодействия и учитывая вид оператора

*) Естественно, если в шредингеровском представлении $\frac{\partial}{\partial t} \hat{H} = 0$.

$U = \exp(iH_0 t/\hbar)$, находим

$$\hat{f}_{\text{int}} = \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \hat{f} \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar), \quad (1)$$

$$\Psi_{\text{int}}(t) = \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \Psi(t), \quad (2)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{int}} = \hat{H}'_{\text{int}} \Psi_{\text{int}} \equiv \hat{V}_{\text{int}} \Psi_{\text{int}}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}'_{\text{int}} &= \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) (\hat{H}_0 + \hat{V}) \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar) + \\ &+ i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \right) \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar) = \\ &= \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \hat{V} \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar) = \hat{V}_{\text{int}} \end{aligned}$$

(при установлении вида волнового уравнения (3) в представлении взаимодействия учтен результат задачи 7.28).

Продифференцировав по времени обе части соотношения (1), находим вид уравнений движения для операторов в представлении взаимодействия:

$$\frac{d}{dt} \hat{f}_{\text{int}} = \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right)_{\text{int}} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{f}_{\text{int}}]$$

(обычно операторы физических величин \hat{f} в шредингеровском представлении не зависят явно от времени и для них $\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \hat{f} = \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \hat{f} \right)_{\text{int}} \equiv 0$).

7.38. В рассматриваемом случае $H_0 = \hat{p}^2/2m$, $V = -F_0 \hat{x}$, и, воспользовавшись результатом задачи 7.29, находим

$$\hat{x}_{\text{int}} = \exp\left(\frac{i\hat{p}^2 t}{2m\hbar}\right) \hat{x} \exp\left(-\frac{i\hat{p}^2 t}{2m\hbar}\right) = \hat{x} + \frac{t}{m} \hat{p}, \quad \hat{p}_{\text{int}} = \hat{p},$$

$$\hat{V}_{\text{int}} = -F_0 \left(\hat{x} + \frac{t}{m} \hat{p} \right),$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{int}} = \hat{V}_{\text{int}} \Psi_{\text{int}} = -F_0 \left(\hat{x} + \frac{t}{m} \hat{p} \right) \Psi_{\text{int}}.$$

7.39. Точно так же, как и в предыдущей задаче, находим

$$\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m, \quad \hat{V} = k\hat{x}^2/2, \quad \hat{x}_{\text{int}} = \hat{x} + \frac{t}{m} \hat{p},$$

$$\hat{p}_{\text{int}} = \hat{p}, \quad \hat{V}_{\text{int}} = (k\hat{x}^2/2)_{\text{int}} = \frac{k}{2} \left(\hat{x} + \frac{t}{m} \hat{p} \right)^2,$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{int}} = \hat{V}_{\text{int}} \Psi_{\text{int}} = \frac{k}{2} \left(\hat{x} + \frac{t}{m} \hat{p} \right)^2 \Psi_{\text{int}}.$$

7.40. Учитывая вид гамильтониана частицы

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) \hat{\sigma},$$

находим согласно стандартным формулам

$$\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{r}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m},$$

$$\hat{v}_i = \hat{v}_i = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{v}_i] = \frac{-\mu}{m} \hat{\sigma}_k \left[\mathcal{H}_k, \frac{\partial}{\partial x_i} \right] = \frac{\mu}{m} \hat{\sigma}_k \frac{\partial \mathcal{H}_k}{\partial x_i}.$$

Оператор ускорения можно записать в весьма наглядном виде:

$$m\hat{\mathbf{w}} = -\text{grad } \hat{U},$$

где

$$\hat{U} = -\hat{\mu}\mathcal{H} = -\mu\hat{\mathcal{H}}\hat{\sigma}$$

(проведенное рассмотрение относится к частице со спином $s = 1/2$; однако обобщение на случай нейтральной частицы с произвольным спином s тривиально и сводится к замене $\hat{\sigma}$ на $\hat{\mathbf{s}}/s$).

7.41. Направив ось z вдоль магнитного поля, представим спиновую часть гамильтониана и волновое уравнение для спиновой в. ф. в виде

$$\hat{H} = -\mu\mathcal{H}_0\hat{\sigma}_z, \quad \Psi(t) = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \hat{H}\Psi(t),$$

или

$$i\hbar\dot{C}_1 = -\mu\mathcal{H}_0C_1, \quad i\hbar\dot{C}_2 = \mu\mathcal{H}_0C_2. \quad (1)$$

Решение уравнений (1) имеет вид

$$C_1(t) = \exp(i\omega t) C_1(0), \quad C_2(t) = \exp(-i\omega t) C_2(0), \quad (2)$$

где $\omega = \mu\mathcal{H}_0/\hbar$, а значения постоянных $C_{1,2}(0)$ определяются из начальных условий; для нормированной спиновой функции $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$.

Средние значения компонент вектора спина изменяются со временем по закону

$$\overline{s(t)} = \frac{1}{2} \Psi^*(t) \hat{\sigma} \Psi(t), \quad \overline{s_x(t)} = \overline{s_x(0)} \cos 2\omega t + \overline{s_y(0)} \sin 2\omega t,$$

$$\overline{s_y(t)} = \overline{s_y(0)} \cos 2\omega t - \overline{s_x(0)} \sin 2\omega t, \quad \overline{s_z(t)} = \overline{s_z(0)} = \text{const},$$

т. е. вектор $\overline{s(t)}$ прецессирует с угловой скоростью 2ω вокруг направления магнитного поля (оси z).

7.42. Результат предыдущей задачи очевидным образом обобщается на случай переменного во времени по величине, но постоянного по направлению магнитного поля, т. е. поля вида $\mathcal{H}(t) = (0, 0, \mathcal{H}(t))$.

Волновое уравнение для спиновой в. ф. принимает вид

$$i\hbar\dot{C}_1 = -\mu\mathcal{H}(t)C_1, \quad i\hbar\dot{C}_2 = \mu\mathcal{H}(t)C_2. \quad (1)$$

Решение уравнений (1):

$$C_1(t) = C_1(0) \exp(i\xi(t)), \quad C_2(t) = C_2(0) \exp(-i\xi(t)),$$

где $\xi(t) = \frac{\mu}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt$.

Средние значения компонент спина изменяются со временем по закону

$$\begin{aligned} \overline{s_x(t)} &= \overline{s_x(0)} \cos 2\xi(t) + \overline{s_y(0)} \sin 2\xi(t), \\ \overline{s_y(t)} &= \overline{s_y(0)} \cos 2\xi(t) - \overline{s_x(0)} \sin 2\xi(t), \quad s_z(t) = \overline{s_z(0)}, \end{aligned}$$

т. е. вектор $\overline{\mathbf{s}(t)}$ вращается (вообще говоря, неравномерно) вокруг оси z , вдоль которой направлено магнитное поле.

7.43. Оператор Гамильтона частицы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\varphi(\mathbf{r}, t) - \mu \mathcal{H}(t) \hat{\sigma}. \quad (1)$$

Пусть при $t = 0$ в. ф. частицы представима в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t=0) = \psi(\mathbf{r}, t=0) \chi(t=0), \quad (2)$$

где $\chi(t=0) = \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix}$ — произвольная спиновая в. ф. (не зависящая от \mathbf{r} !), т. е. при $t = 0$ нет корреляции между спиновыми и пространственными переменными. Легко убедиться в том, что в. ф. вида

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) \chi(t) \quad (3)$$

является решением временного у. Ш. с гамильтонианом (1), если функции ψ и χ удовлетворяют у. Ш.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi \right] \psi, \quad i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = -\mu \mathcal{H} \hat{\sigma} \chi,$$

первое из которых не содержит спиновых, а второе — пространственных переменных частицы, так что между пространственными и спиновыми переменными нет корреляции и в произвольный последующий момент времени t .

Учитывая, что в. ф. произвольного состояния частицы при $t = 0$ можно представить в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t=0) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t=0) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t=0) \end{pmatrix} = \psi_1(\mathbf{r}, t=0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(\mathbf{r}, t=0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где каждое из двух слагаемых представляет в. ф. с разделенными спиновыми и пространственными переменными (т. е. имеет вид в. ф. (2)), на основании выражений (2) и (3) и линейности у. Ш. приходим к доказательству утверждения в условии задачи. Итак, в. ф. (4) состояния частицы в произвольный

момент времени представляется в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t)\chi_1(t) + \psi_2(\mathbf{r}, t)\chi_2(t), \quad (5)$$

где смысл функций $\psi_1, \chi_1, \psi_2, \chi_2$ очевиден.

Ясно, что утверждение задачи остается справедливым и для частицы с произвольным значением спина.

7.44. Спиновый гамильтониан и у.Ш. для спиновой в.ф. имеют вид

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\mu \mathcal{H}(t) \hat{\sigma} = -\mu \begin{pmatrix} \mathcal{H}_1 & \mathcal{H}_0 \exp(-i\omega_0 t) \\ \mathcal{H}_0 \exp(i\omega_0 t) & -\mathcal{H}_1 \end{pmatrix}, \\ \Psi &= \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}, \\ i\hbar \dot{a} &= -\mu \mathcal{H}_1 a - \mu \mathcal{H}_0 \exp(-i\omega_0 t) b, \\ i\hbar \dot{b} &= -\mu \mathcal{H}_0 \exp(i\omega_0 t) a + \mu \mathcal{H}_1 b. \end{aligned} \quad (1)$$

Перейдя к новым функциям $\tilde{a}(t), \tilde{b}(t)$ согласно формулам

$$a = \exp\left(-\frac{i\omega_0 t}{2}\right) \tilde{a}, \quad b = \exp\left(\frac{i\omega_0 t}{2}\right) \tilde{b},$$

перепишем систему уравнений (1) в виде

$$i\dot{\tilde{a}} = -\gamma_1 \tilde{a} - \gamma_2 \tilde{b}, \quad i\dot{\tilde{b}} = -\gamma_2 \tilde{a} + \gamma_1 \tilde{b}, \quad (2)$$

где $\gamma_1 = \frac{\mu \mathcal{H}_1}{\hbar} + \frac{\omega_0}{2}$, $\gamma_2 = \frac{\mu \mathcal{H}_0}{\hbar}$.

По общим правилам находим решение системы уравнений (2) в виде

$$\begin{aligned} \tilde{a}(t) &= C_1 \exp(i\omega t) + C_2 \exp(-i\omega t), \\ \tilde{b}(t) &= \frac{\omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_1 \exp(i\omega t) + \frac{-\omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_2 \exp(-i\omega t), \end{aligned}$$

где $\omega = \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}$.

Учитывая, что согласно начальным условиям $\tilde{a}(0) = a(0) = 1$, $\tilde{b}(0) = b(0) = 0$, находим окончательный вид нормированной в.ф.:

$$\Psi(t) = \frac{1}{2\omega} \begin{pmatrix} [(\omega + \gamma_1) e^{i\omega t} + (\omega - \gamma_1) e^{-i\omega t}] \exp\left(-\frac{i\omega_0 t}{2}\right) \\ 2i\gamma_2 \sin \omega t \cdot \exp\left(\frac{i\omega_0 t}{2}\right) \end{pmatrix},$$

так что вероятность переверота спина (т. е. значения проекции $s_z = -1/2$) в момент времени t равна

$$W(s_z = -1/2, t) = \left(\frac{\gamma_2}{\omega}\right)^2 \sin^2 \omega t \equiv g \sin^2 \omega t,$$

где $g = \left(\frac{\gamma_2}{\omega}\right)^2 = \frac{\mathcal{H}_0^2}{\mathcal{H}_0^2 + (\mathcal{H}_1 + \hbar\omega_0/2\mu)^2}$.

Величина g (а с нею и вероятность переворота спина) при $|\mathcal{H}_0| \ll |\mathcal{H}_1|$ мала по сравнению с единицей при всех значениях частоты ω_0 , за исключением узкой области частот вблизи точки $(\omega_0)_{\text{рез}} = -2\mu\mathcal{H}_1/\hbar$ шириной порядка $|\Delta\omega_0| \sim \mathcal{H}_0\mu/\hbar$.

7.45. а) Оператор Гамильтона и унитарный оператор, осуществляющий преобразование к гайзенберговскому представлению, имеют вид

$$\hat{H} = -\mu\mathcal{H}\hat{\sigma}_z, \quad \hat{U} = \exp(i\hat{H}t/\hbar) \equiv \exp(-i\omega t\hat{\sigma}_z)$$

(ось z направлена вдоль магнитного поля).

Воспользовавшись результатом задачи 1.14 и учитывая коммутационные соотношения для матриц Паули $[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y$, $[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_y] = -2i\hat{\sigma}_x$, находим

$$\begin{aligned} \hat{s}_x(t) &= 1/2 \exp(-i\omega t\hat{\sigma}_z) \hat{\sigma}_x \exp(i\omega t\hat{\sigma}_z) = \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \hat{\sigma}_x + \frac{1}{1!} (-i\omega t) [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] + \frac{1}{2!} (-i\omega t)^2 [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x]] + \dots \right\} = \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \hat{\sigma}_x + \frac{1}{1!} 2\omega t \hat{\sigma}_y - \frac{(2\omega t)^2}{2!} \hat{\sigma}_x + \dots \right\} = \hat{s}_x \cos 2\omega t + \hat{s}_y \sin 2\omega t, \\ \hat{s}_y(t) &= \hat{s}_y \cos 2\omega t - \hat{s}_x \sin 2\omega t, \quad \hat{s}_z(t) = \hat{s}_z. \end{aligned}$$

Так как в гайзенберговском представлении в.ф. не зависит от времени, то из вида операторов $\hat{s}(t)$ непосредственно следует вид $\underline{s}(t)$.

б) Гамильтониан, выраженный через гайзенберговские операторы, имеет вид $\hat{H}(t) = -2\mu\mathcal{H}\hat{s}_z(t)$. Временная зависимость операторов $\hat{s}_i(t)$ определяется уравнениями

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{s}_x(t) &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{s}_x(t)] = 2\omega \hat{s}_y(t), \\ \frac{d\hat{s}_y(t)}{dt} &= -2\omega \hat{s}_x(t), \quad \frac{d}{dt} \hat{s}_z(t) = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где, как и выше, $\omega = \mu\mathcal{H}/\hbar$ и при получении (1) учтены коммутационные соотношения $[\hat{s}_i(t), \hat{s}_k(t)] = i\epsilon_{ikl}\hat{s}_l(t)$.

Из (1) следует $\hat{s}_z(t) = \hat{s}_z(0) = 1/2\hat{\sigma}_z$.

Введем операторы $\hat{s}_{\pm}(t) = \hat{s}_x(t) \pm i\hat{s}_y(t)$. Согласно (1) имеем

$$\frac{d}{dt} \hat{s}_{\pm}(t) = \mp 2i\omega \hat{s}_{\pm}(t). \quad (2)$$

Уравнения (2) для операторов $\hat{s}_{\pm}(t)$ ввиду их линейности можно решать так же, как и для обычных (неоператорных) функций; решение имеет вид

$$\hat{s}_{\pm}(t) = \exp(\mp 2i\omega t) \hat{s}_{\pm}(0) = 1/2 \exp(\mp 2i\omega t) (\hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y). \quad (3)$$

Из соотношений (3) следует установленный выше (в разделе а)) вид гайзенберговских операторов $\hat{s}_x(t)$ и $\hat{s}_y(t)$.

7.46. Задача решается совершенно аналогично предыдущей. Следует иметь в виду, что, несмотря на явную зависимость от времени гамильтониана в шредингеровском представлении: $\hat{H}_w(t) = -\mu\mathcal{H}(t)\hat{\sigma}_z$, унитарный оператор, описывающий переход от шредингеровского представления к гайзенберговскому, имеет простой вид:

$$\hat{U} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}_w(t') dt'\right) \equiv \exp\left(-\frac{i\mu}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt \hat{\sigma}_z\right) \quad (1)$$

(при $t=0$ оба представления совпадают); для справедливости выражения (1) существенно, что операторы $\hat{H}(t)$ в шредингеровском представлении в различные моменты времени коммутируют.

Приведем явный вид операторов компонент спина в гайзенберговском представлении:

$$\begin{aligned} \hat{s}_x(t) &= \frac{1}{2} [\cos(2\xi(t)) \hat{\sigma}_x + \sin(2\xi(t)) \hat{\sigma}_y], & \hat{s}_z(t) &= \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z, \\ \hat{s}_y(t) &= \frac{1}{2} [\cos(2\xi(t)) \hat{\sigma}_y - \sin(2\xi(t)) \hat{\sigma}_x], & \xi(t) &= \frac{\mu}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt. \end{aligned}$$

7.47. В шредингеровском представлении гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = -\mu\mathcal{H}_1\hat{\sigma}_z - \mu\mathcal{H}_0(\hat{\sigma}_x \cos \omega_0 t + \hat{\sigma}_y \sin \omega_0 t) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}(t).$$

Переход к представлению взаимодействия осуществляется оператором $\hat{U} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) = \exp(-i\tilde{\omega} t \hat{\sigma}_z)$, где $\tilde{\omega} = \mu\mathcal{H}_0/\hbar$. Операторы компонент спина в представлении взаимодействия имеют вид гайзенберговских операторов для гамильтониана \hat{H}_0 и на основании результата задачи 7.45 равны

$$\begin{aligned} \hat{s}_{x \text{ int}}(t) &= \frac{1}{2} [\hat{\sigma}_x \cos 2\tilde{\omega} t + \hat{\sigma}_y \sin 2\tilde{\omega} t], & \hat{s}_{z \text{ int}}(t) &= \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z, \\ \hat{s}_{y \text{ int}}(t) &= \frac{1}{2} [\hat{\sigma}_y \cos 2\tilde{\omega} t - \hat{\sigma}_x \sin 2\tilde{\omega} t]. \end{aligned}$$

В у. Ш. в представлении взаимодействия

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{int}} = \hat{V}_{\text{int}}(t) \Psi_{\text{int}} \quad (1)$$

оператор $\hat{V}_{\text{int}}(t)$ равен

$$\hat{V}_{\text{int}} = -\mu\mathcal{H}_0 [\hat{\sigma}_x \cos(\omega_0 + 2\tilde{\omega})t + \hat{\sigma}_y \sin(\omega_0 + 2\tilde{\omega})t]. \quad (2)$$

Уравнение (1) с гамильтонианом \hat{V}_{int} (2) имеет вид уравнения, рассмотренного в 7.44 (в формулах задачи 7.44 следует заменить ω_0 на $\omega_0 + 2\tilde{\omega}$ и положить $\mathcal{H}_1 = 0$). Используя результат задачи 7.44, находим в. ф. в представлении взаимодействия,

удовлетворяющую начальным условиям $\Psi_{\text{int}}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$:

$$\Psi_{\text{int}}(t) = \frac{1}{2\omega} \begin{pmatrix} \left[\left(\omega + \tilde{\omega} + \frac{\omega_0}{2} \right) e^{i\omega t} + \left(\omega - \tilde{\omega} - \frac{\omega_0}{2} \right) e^{-i\omega t} \right] e^{-\frac{i(\omega_0 + 2\tilde{\omega})t}{2}} \\ 2i\gamma \sin \omega t \exp \left[\frac{i}{2} (\omega_0 + 2\tilde{\omega}) t \right] \end{pmatrix},$$

где $\gamma = \mu\mathcal{H}_0/\hbar$, $\omega = \sqrt{(\tilde{\omega} + \omega_0/2)^2 + \gamma^2}$.

Так как оператор $\hat{s}_{z \text{ int}}(t) = \hat{\sigma}_z/2$ не зависит от времени (и сохраняет диагональный вид), то смысл верхней и нижней компонент в. ф. $\Psi_{\text{int}}(t)$ такой же, как и в шредингеровском представлении: они являются амплитудами вероятностей значений проекции спина на ось z , равных $+1/2$ и $-1/2$ соответственно.

Квадрат модуля нижней компоненты в. ф. $\Psi_{\text{int}}(t)$ определяет вероятность переворота спина в согласии с результатом задачи 7.44.

7.48. Гамильтониан в шредингеровском представлении имеет вид

$$\hat{H} = -\mu\mathcal{H}_1\hat{\sigma}_z - \mu\mathcal{H}_0\hat{\sigma}_x \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}.$$

Переход к представлению взаимодействия осуществляется унитарным оператором $\hat{U} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right) = \exp(-i\tilde{\omega}t\hat{\sigma}_z)$, где $\tilde{\omega} = \frac{\mu\mathcal{H}_1}{\hbar}$.

Операторы компонент спина и у. Ш. в представлении взаимодействия:

$$\begin{aligned} \hat{s}_{x \text{ int}}(t) &= \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_x \cos 2\tilde{\omega}t + \hat{\sigma}_y \sin 2\tilde{\omega}t), & \hat{s}_{z \text{ int}}(t) &= \frac{\hat{\sigma}_z}{2}, \\ \hat{s}_{y \text{ int}}(t) &= \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_y \cos 2\tilde{\omega}t - \hat{\sigma}_x \sin 2\tilde{\omega}t), \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{int}} &= \hat{V}_{\text{int}}(t) \Psi_{\text{int}}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\hat{V}_{\text{int}}(t) = -2\mu\mathcal{H}_0\hat{s}_{x \text{ int}}(t) = -\mu\mathcal{H}_0(\hat{\sigma}_x \cos 2\tilde{\omega}t + \hat{\sigma}_y \sin 2\tilde{\omega}t).$$

Уравнение (1) имеет вид уравнения, которое было решено в 7.44 (если в формулах задачи 7.44 заменить ω_0 на $2\tilde{\omega}$ и положить $\mathcal{H}_1 = 0$). Учитывая результат решения указанной задачи, находим в. ф. $\Psi_{\text{int}}(t)$, имеющую при $t = 0$ вид $\Psi_{\text{int}}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$:

$$\Psi_{\text{int}}(t) = \frac{1}{2\omega} \begin{pmatrix} \left[(\omega + \tilde{\omega}) e^{i\omega t} + (\omega - \tilde{\omega}) e^{-i\omega t} \right] e^{-i\tilde{\omega}t} \\ 2i\gamma \sin \omega t \exp(i\tilde{\omega}t) \end{pmatrix},$$

где $\gamma = \mu\mathcal{H}_0/\hbar$, $\omega = \sqrt{\tilde{\omega}^2 + \gamma^2}$.

Так как оператор $\hat{s}_{z \text{ int}}(t) = \hat{\sigma}_z/2$ не зависит от времени, то компоненты в. ф. $\Psi_{\text{int}}(t)$ имеют обычный смысл и вероятность

значения проекции $s_z = -1/2$ в момент времени t равна

$$W(s_z = -1/2, t) = \left(\frac{\nu}{\omega}\right)^2 \sin^2 \omega t = \frac{\mathcal{H}_0^2}{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}_1^2} \sin^2 \omega t.$$

7.49. Функция Грина $G_{\alpha\beta}(t, t')$, удовлетворяющая по переменным α, t у. Ш. с гамильтонианом $H = -\mu\mathcal{H}\hat{\sigma}_z$ (ось z направлена вдоль магнитного поля) и при $t = t'$ равная $G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$, имеет вид

$$G_{\alpha\beta}(t) = \begin{pmatrix} \exp[i\omega(t-t')] & 0 \\ 0 & \exp[-i\omega(t-t')] \end{pmatrix}_{\alpha\beta}, \quad \omega = \mu\mathcal{H}/\hbar.$$

7.50.

$$G_{\alpha\beta}(t, t') = \begin{pmatrix} \exp[i\xi(t, t')] & 0 \\ 0 & \exp[-i\xi(t, t')] \end{pmatrix}_{\alpha\beta},$$

$$\xi(t, t') = \frac{\mu}{\hbar} \int_{t'}^t \mathcal{H}(t) dt.$$

$$7.51. \quad G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') G_{\alpha\beta}(t, t')^*,$$

где $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ — временная функция Грина свободной бесспиновой частицы, найденная в 7.19, $G_{\alpha\beta}(t, t')$ — временная спиновая функция Грина, вид которой установлен в 7.49.

$$7.52. \quad G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') G_{\alpha\beta}(t, t')^*,$$

где вид временной спиновой функции $G_{\alpha\beta}(t, t')$ установлен в 7.50.

Глава 8

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ. ВНЕЗАПНЫЕ И АДИАБАТИЧЕСКИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ

8.1. С. ф. и с. з. невозмущенного гамильтониана имеют вид (см. 2.1)

$$\Psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a}, \quad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2ma^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Простое вычисление дает:

$$a) \quad E_n^{(1)} = V_{nn} = V_0 \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1 + (-1)^n}{\pi^2 (n+1)^2} \right\};$$

$$б) \quad E_n^{(1)} = V_{nn} = \frac{V_0}{a} \left\{ a - 2b + \frac{a}{\pi(n+1)} \sin \frac{2\pi(n+1)b}{a} \right\}.$$

*) Мультипликативный вид функции Грина отражает полученный ранее в 7.43 результат о разделении пространственных и спиновых переменных при движении частицы в произвольном однородном магнитном поле $\mathcal{H}(t)$.

Условие применимости теории возмущений $|V_{nm}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$, как легко сообразить, принимает вид

$$|V_0| \ll \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} (n+1). \quad (1)$$

Соотношение (1) означает, что при возмущении произвольной величины сдвиг энергетических уровней с достаточно большим значением n может быть рассчитан по теории возмущений.

8.2. В выражении для $E_n^{(1)}$

$$E_n^{(1)} = \int_0^a V(x) \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi(n+1)x}{a} dx = \frac{1}{a} \int_0^a V(x) \left\{ 1 - \cos \frac{2\pi(n+1)x}{a} \right\} dx$$

второе слагаемое под знаком интеграла, содержащее $\cos \frac{2\pi(n+1)x}{a}$, при $n \gg 1$ быстро осциллирует, так что при $n \rightarrow \infty$ соответствующий интеграл $\rightarrow 0$:

$$\int_0^a V(x) \cos \frac{2\pi(n+1)x}{a} dx = -\frac{a}{2\pi(n+1)} \int_0^a \frac{\partial V}{\partial x} \sin \frac{2\pi(n+1)x}{a} dx \rightarrow 0.$$

Таким образом, при $n \rightarrow \infty$

$$E_n^{(1)} \approx \frac{2}{a} \int_0^a V(x) dx. \quad (1)$$

Фактически значения n , при которых имеет место соотношение (1), определяются условием $n \gg a/l$, где l представляет интервал переменной x , на котором существенно изменяется функция $V(x)$. Иллюстрацией полученного соотношения (1) могут служить результаты предыдущей задачи.

8.3. Учитывая вид нормированных с. ф. невозмущенного гамма-гильтониана

$$\Psi_n^{(0)}(x) = (2^n \sqrt{\pi} a n!)^{-1/2} \exp[-1/2(x/a)^2] H_n(x/a), \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega},$$

рекуррентное соотношение для полиномов Эрмита

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0$$

и ортогональность с. ф., легко находим матричные элементы координаты x_{nm} (а с ними и матричные элементы возмущения $V_{nm} = -e\mathcal{E}x_{nm}$):

$$x_{mn} = x_{nm} = \begin{cases} a \sqrt{\frac{(n+1)}{2}} & \text{при } m = n+1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (1)$$

По стандартным формулам теории возмущений находим

$$E_n \approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum'_m \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \\ = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2 a^2 \mathcal{E}^2}{2\hbar\omega} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}. \quad (2)$$

Полученное во втором порядке теории возмущений значение E_n совпадает с точным (см. 2.6). Поэтому представляется очевидным, что поправки третьего и более высоких порядков теории возмущений к энергетическим уровням тождественно равны нулю.

8.4. Матричные элементы V_{nm} возмущения $V = \alpha x^2/2$ легко вычислить, используя результат предыдущей задачи для значений матричных элементов x_{nm} и учитывая соотношение

$$(x^2)_{nm} = \sum_k x_{nk} x_{km}.$$

$$V_{nm} = V_{mn} = \begin{cases} \frac{\alpha a^2}{4} (2n+1), & n=m, \\ \frac{\alpha a^2}{2} \sqrt{(n+1)(n+2)}, & m=n+2, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (1)$$

Учитывая значения (1) матричных элементов, по стандартным формулам теории возмущений находим значения энергетических уровней с точностью до членов второго порядка включительно в виде ($\omega = \sqrt{k/m}$)

$$E_n \approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{\alpha}{2k} - \frac{\alpha^2}{8k^2} \right).$$

Полученный результат полезно сравнить с точным выражением для энергетических уровней:

$$E_n = \hbar \sqrt{\frac{k+\alpha}{m}} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 + \frac{\alpha}{k}} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \\ = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{\alpha}{2k} - \frac{\alpha^2}{8k^2} + \frac{\alpha^3}{16k^3} - \dots \right), \quad (2)$$

т. е. первые два члена $E_n^{(1, 2)}$ ряда теории возмущений совпадают с соответствующими членами разложения в ряд по параметру α/k точного значения E_n . Этого и следовало ожидать. Представляется очевидным, что и дальнейшие члены ряда теории возмущений $E_n^{(p)}$ совпадут с соответствующими членами разложения (2). Условие сходимости ряда теории возмущений, как и ряда (2), имеет вид $|\alpha/k| \leq 1$.

8.5. Простое вычисление дает следующие значения матричных элементов V_{nm} возмущения:

$$V_{nm} = \frac{2V_0}{a} \int_0^a \cos^2 \frac{\pi x}{a} \sin \frac{(n+1)\pi x}{a} \sin \frac{(m+1)\pi x}{a} dx =$$

$$= \begin{cases} V_0/4, & n = m = 0, \\ V_0/2, & n = m \neq 0, \\ V_0/4, & n = m \pm 2, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (1)$$

Значение поправки первого порядка $E_n^{(1)} = V_{nn}$ следует из (1). Поправка второго порядка просто находится по стандартной формуле и равна

$$E_n^{(2)} = \sum'_m \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{ma^2 V_0^2}{96\pi^2 \hbar^2} \cdot \begin{cases} -\frac{3}{2}, & n = 0, \\ -1, & n = 1, \\ \frac{6}{n(n+2)}, & n \geq 2. \end{cases}$$

Условие применимости теории возмущений:

$$|V_0| \ll \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} (n+1).$$

$$8.6. E_0^{(3)} = \frac{m^2 a^4 V_0^3}{1024 \pi^4 \hbar^4}.$$

8.7. С. ф. невозмущенного гамильтониана приведены, например, в решении задачи 8.1. Матричные элементы возмущения V_{nm} отличны от нуля лишь при четных значениях n и m и равны

$$V_{nm} = \frac{2\alpha}{a} \sin \frac{\pi(n+1)}{2} \sin \frac{\pi(m+1)}{2} = \frac{2\alpha}{a} (-1)^{\frac{n+m}{2}}, \quad (1)$$

так что поправки первого $E_n^{(1)}$, второго $E_n^{(2)}$ (и вообще произвольного) порядка к нечетным уровням энергии равны нулю — в согласии с точным решением, см. 2.17.

Поправка первого порядка к четным уровням равна $E_n^{(1)} = 2\alpha/a$, n — четное. Поправка второго порядка к четным уровням имеет вид ($m = 2\rho$)

$$E_n^{(2)} = \sum'_m \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \equiv \frac{8m\alpha^2}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{\substack{p=0 \\ p \neq n/2}}^{\infty} \frac{1}{(n+1)^2 - (2p+1)^2}. \quad (2)$$

Сумму, входящую в выражение (2), легко вычислить, если за-

писать ее в виде ($n \equiv 2k$)

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{p=0 \\ p \neq k}} \frac{1}{(2k+1)^2 - (2p+1)^2} &= \frac{1}{4(2k+1)} \sum_{\substack{p=0 \\ p \neq k}} \left\{ \frac{1}{p+k+1} - \frac{1}{p-k} \right\} = \\ &= -\frac{1}{4(2k+1)^2} = -\frac{1}{4(n+1)^2} \end{aligned}$$

(все слагаемые суммы взаимно уничтожаются, за исключением одного: $(p-k)^{-1}$ при $p=3k+1$). Таким образом,

$$E_n^{(2)} = -\frac{2m\alpha^2}{\pi^2 \hbar^2 (n+1)^2}, \quad n - \text{четное.}$$

Условие применимости полученных результатов имеет вид

$$\left| \frac{\alpha}{a} \right| \ll \frac{\hbar^2}{\pi^2 m a^2} (n+1).$$

8.8. Нормированные с. ф. любого оператора определены с точностью до фазового множителя $A_n = \exp(i\alpha_n)$, где α_n — вещественное число. Считая, что число α_n имеет вид

$$\alpha_n = 1 + C_n^{(1)} + C_n^{(2)} + C_n^{(3)} + \dots, \quad (1)$$

где в последовательности чисел $C_n^{(p)}$ каждый последующий член имеет относительную малость порядка параметра теории возмущений по сравнению с предыдущим, приходим к выводу, что в любом порядке теории возмущений при расчете коэффициента $c_{n'n}^{(p)}$ имеется неопределенность, соответствующая произвольному выбору коэффициента $C_n^{(p)}$ в выражении (1), так как функции Ψ_n и $A_n \Psi_n$ с равным правом могут быть выбраны в качестве искомым с. ф. гамильтониана.

8.9. С. ф. и с. з. невозмущенного ротатора имеют вид (см. 4.1)

$$\Psi_m^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Возмущение равно $V = -d\mathcal{E}_0 = -d\mathcal{E}_0 \cos \varphi$. Используя формулу $\cos \varphi = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2$, находим

$$V_{nk} = \begin{cases} -d\mathcal{E}_0/2, & n = k \pm 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (1)$$

Применение стандартных формул теории возмущений к основному состоянию ротатора ($m=0$), являющемуся невырожденным, дает

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -d^2 \mathcal{E}_0^2 I / \hbar^2. \quad (2)$$

Поляризуемость ротатора α определяется как отношение индуцированного дипольного момента к напряженности внешнего поля. Так как энергия индуцированного диполя в поле \mathcal{E}_0 равна

$\Delta E = -\alpha \mathcal{E}_0^2/2$, то согласно (2) поляризуемость основного состояния ротатора равна

$$\alpha_0 = 2Id^2/\hbar^2.$$

8.10. Возбужденные состояния невозмущенного ротатора являются двукратно вырожденными, и следует воспользоваться секулярным уравнением *).

Так как все четыре матричных элемента $V_{mm'}$ между состояниями m и m' , относящимися к одному и тому же энергетическому уровню ($m, m' = \pm |m|$), равны нулю, то поправка первого порядка к энергетическим уровням невозмущенного ротатора тоже равна нулю.

Для вычисления поправки второго порядка $E_m^{(2)}$ к возбужденным уровням следует воспользоваться общей формулой [3]

$$\left| \sum_k \frac{V_{mk}V_{km'}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} - E_m^{(2)}\delta_{mm'} \right| = 0, \quad (1)$$

в которой индексы $m, m' = \pm |m|$ нумеруют различные состояния, относящиеся к рассматриваемому двукратно вырожденному уровню, а индекс k нумерует остальные состояния невозмущенного ротатора.

При применении формулы (1) к первому возбужденному уровню $|m|=1$ (см. 8.9) под m, m' следует понимать значения ± 1 , а под k — все остальные: $0, \pm 2, \dots$. С учетом соотношений (1) предыдущей задачи выражение (1) принимает вид

$$\begin{vmatrix} A/3 - E_{m=1}^{(2)} & A/2 \\ A/2 & A/3 - E_{m=1}^{(2)} \end{vmatrix} = 0, \quad A \equiv \frac{Id^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2}. \quad (2)$$

Из (2) следует

$$E_{1,1}^{(2)} = -\frac{Id^2\mathcal{E}_0^2}{6\hbar^2}, \quad E_{1,2}^{(2)} = \frac{5Id^2\mathcal{E}_0^2}{6\hbar^2}, \quad (3)$$

т. е. двукратно вырожденный уровень ротатора с $|m|=1$ в однородном электрическом поле расщепляется на два (вырождение снимается).

*) Фактически в данной задаче нет необходимости применять теорию возмущений в случае вырождения. Действительно, имея в виду симметрию гамильтониана, легко сообразить, что правильными функциями нулевого приближения являются (сравнить с 4.1)

$$\Psi_{m,1}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos m\varphi, \quad \Psi_{m,2}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin m\varphi,$$

и при расчете смещений энергетических уровней $E_{m,1,2}$ можно использовать более простые формулы теории возмущений без вырождения.

Правильные функции нулевого приближения, соответствующие расщепленным энергетическим уровням (3), имеют вид

$$\Psi_{1,1}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin \varphi, \quad \Psi_{1,2}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos \varphi,$$

очевидный заранее из соображений симметрии.

Применение формулы (1) к уровням невозмущенного ротатора с $|m| \geq 2$ дает (при этом недиагональные элементы матрицы в левой части уравнения (1) равны нулю)

$$E_{m,1}^{(2)} = E_{m,2}^{(2)} = \frac{I d^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2 (4m^2 - 1)},$$

т.е. в рассматриваемом приближении происходит лишь сдвиг уровня, но не его расщепление (внимательный читатель сообразит, что расщепление происходит в $2|m|$ -м порядке теории возмущений).

8.11. С.ф. и уровни энергии невозмущенного ротатора (см. 4.3) и возмущение имеют вид

$$\Psi_{lm}^{(0)} = Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad E_{lm}^{(0)} = E_l^{(0)} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I},$$

$$V = -d\mathcal{E}_0 = -d\mathcal{E}_0 \cos \theta$$

(ось z направлена вдоль электрического поля). Учитывая ортогональность шаровых функций и соотношение

$$Y_{10} = i \sqrt{3/4\pi} \cos \theta \equiv Y_{00} i \sqrt{3} \cos \theta,$$

легко находим нужные матричные элементы возмущения:

$$V_{lm,00} = -V_{00,lm} = \begin{cases} i d \mathcal{E}_0 / \sqrt{3}, & l=1, m=0, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

и энергию основного состояния ротатора во втором порядке теории возмущений:

$$E_{00} \approx E_{00}^{(0)} + E_{00}^{(1)} + E_{00}^{(2)} = -\frac{I d^2 \mathcal{E}_0^2}{3\hbar^2}. \quad (1)$$

Из (1) следует значение α_0 поляризуемости основного состояния ротатора (сравнить с 8.9):

$$\alpha_0 = \frac{2I d^2}{3\hbar^2}.$$

8.12. Используя известное соотношение *)

$$(\cos \theta) Y_{lm} = a_{lm} Y_{l+1,m} + b_{lm} Y_{l-1,m},$$

$$a_{lm} = -i \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}, \quad b_{lm} = i \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}},$$

*) Его легко получить, если учесть связь шаровых функций Y_{lm} с присоединенными полиномами Лежандра P_l^m и воспользоваться рекуррентными соотношениями для последних. Напомним, что мы придерживаемся такого же

легко находим матричные элементы возмущения:

$$V_{l'm', lm} = -d\mathcal{E}_0\delta_{mm'} \cdot \begin{cases} a_{lm}, & l' = l + 1, \\ b_{lm}, & l' = l - 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Так как матричные элементы между в. ф., относящимися к одному и тому же невозмущенному энергетическому уровню (т. е. с одинаковым значением l), равны нулю, то и поправки первого порядка к уровням энергии равны нулю.

Для расчета поправок второго и более высоких порядков к уровням энергии нет необходимости использовать теорию возмущений при наличии вырождения, если учесть, что оператор \hat{l}_z коммутирует с гамильтонианом ротатора и при наличии возмущения, и, следовательно, точные с. ф. гамильтониана могут быть выбраны в виде с. ф. l_z . Так как при заданном значении m невозмущенному уровню $E_l^{(0)}$ отвечает только одна с. ф. Y_{lm} , то для расчета сдвига энергетического уровня состояния с квантовыми числами l, m можно использовать теорию возмущений без вырождения, и поправка второго порядка равна ($l \geq 1$)

$$\begin{aligned} E_{lm}^{(2)} &= \sum_{l', m'} \frac{|V_{l'm', lm}|^2}{E_l^{(0)} - E_{l'}^{(0)}} = \sum_{l'} \frac{|V_{l'm', lm}|^2}{E_l^{(0)} - E_{l'}^{(0)}} = \\ &= \frac{1d^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \frac{2l^3 + 3l^2 + l - m^2(l^2 + 6l + 3)}{l(l+1)(2l-1)(2l+1)(2l+3)} \quad (1) \end{aligned}$$

(из секулярного уравнения очевидным образом получается такое же значение для $E_{lm}^{(2)}$). Согласно (1) $(2l+1)$ -кратное вырождение уровня невозмущенного ротатора с моментом l частично снимается: он расщепляется на $l+1$ уровней, из которых один (с $m=0$) является невырожденным, а остальные l — двукратно вырожденными ($m = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$). Дальнейшего спятия вырождения в высших порядках теории возмущений не происходит. Это связано с тем, что, с одной стороны, величина $m = l_z$ является интегралом движения и может иметь определенное значение одновременно с энергией возмущенного ротатора, а с другой стороны, энергия состояний, отличающихся лишь знаком проекции момента на направление оси z , вдоль которой направлено электрическое поле, одинакова в силу инвариантности гамильтониана относительно зеркального отражения в любой плоскости, проходящей через ось z (при таком отражении проекция аксиального вектора (момент импульса) на

выбора фазовых множителей в определении шаровых функций, как и в книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица [3] (при другом их выборе фазы величин a_{lm} и b_{lm} могут измениться, однако это обстоятельство не сказывается, естественно, на окончательном результате для сдвига уровней).

направление полярного вектора (электрическое поле) меняет знак).

8.13. Рассматриваемый уровень осциллятора является двукратно вырожденным. Отвечающие ему с. ф. выберем в виде (см. 4.5)

$$\Psi_1^{(0)} \equiv \Psi_{10} = \Psi_1^{\text{осц}}(x) \Psi_0^{\text{осц}}(y), \quad \Psi_2^{(0)} \equiv \Psi_{01} = \Psi_0^{\text{осц}}(x) \Psi_1^{\text{осц}}(y),$$

где $\Psi_n^{\text{осц}}(x)$ — хорошо известные с. ф. линейного осциллятора.

Матричные элементы возмущения легко вычисляются (см., например, решение задачи 8.3) и равны

$$V_{11} = V_{22} = 0, \quad V_{12} = V_{21} = \alpha a^2/2.$$

Секулярное уравнение и его решение имеют вид

$$\begin{vmatrix} -E_1^{(1)} & \alpha a^2/2 \\ \alpha a^2/2 & -E_1^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad E_{1,1(2)}^{(1)} = \mp \frac{\alpha a^2}{2},$$

т. е. вырождение уровня снимается.

Правильные функции нулевого приближения находятся согласно стандартным формулам

$$\Psi_{1,1(2)}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} \mp \Psi_2^{(0)})/\sqrt{2}.$$

Отметим, что рассматриваемая задача может быть решена точно, так как путем вращения системы координат в плоскости x, y потенциальная энергия $U(x, y) = k(x^2 + y^2)/2 + \alpha xy$ может быть приведена к диагональному виду $U = k_1 x'^2/2 + k_2 y'^2/2$. Читателю предлагается самостоятельно получить точное решение задачи и сравнить его с расчетами по теории возмущений.

8.14. Второй возбужденный уровень невозмущенного осциллятора является трехкратно вырожденным. Ему отвечают с. ф. (см. решение предыдущей задачи)

$$\begin{aligned} \Psi_1^{(0)} &= \Psi_2^{\text{осц}}(x) \Psi_0^{\text{осц}}(y), & \Psi_2^{(0)} &= \Psi_1^{\text{осц}}(x) \Psi_1^{\text{осц}}(y), \\ \Psi_3^{(0)} &= \Psi_0^{\text{осц}}(x) \Psi_2^{\text{осц}}(y). \end{aligned}$$

Матричные элементы возмущения, отличные от нуля, равны

$$V_{12} = V_{21} = V_{23} = V_{32} = \alpha a^2/\sqrt{2}.$$

Решение секулярного уравнения дает следующие значения поправок первого порядка теории возмущений к энергетическому уровню:

$$E_{2,1}^{(1)} = -\alpha a^2, \quad E_{2,2}^{(1)} = 0, \quad E_{2,3}^{(1)} = \alpha a^2,$$

т. е. уровень расщепляется на три и вырождение полностью снимается.

Правильные функции нулевого приближения, отвечающие расщепленным энергетическим уровням, имеют вид

$$\Psi_{2,1}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} - \sqrt{2} \Psi_2^{(0)} + \Psi_3^{(0)})/2, \quad \Psi_{2,2}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} - \Psi_3^{(0)})/\sqrt{2},$$

$$\Psi_{2,3}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} + \sqrt{2} \Psi_2^{(0)} + \Psi_3^{(0)})/2.$$

8.15. При замене переменных $x' = x$, $y' = y$, $z' = az/b$ у. Ш. и граничное условие для с.ф. гамильтониана принимают вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{a^2}{b^2} \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right) \Psi = E\Psi,$$

$$\Psi(r' = a) = 0.$$

Так как $|a - b| \ll a$, то, обозначив $a = (1 + \varepsilon)b$, $|\varepsilon| \ll 1$, представим гамильтониан в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right), \quad \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} (2\varepsilon + \varepsilon^2) \frac{\partial^2}{\partial z'^2}.$$

С. ф. и энергия основного состояния для невозмущенного гамильтониана, согласно 4.33, равны ($r' \leq a$)

$$\Psi_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2a\pi} r'} \sin \frac{\pi r'}{a}, \quad E_0^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}.$$

Поправка первого порядка по малому параметру ε к энергии основного состояния равна

$$E_0^{(1)} = \int \Psi_0^{(0)} \hat{V} \Psi_0^{(0)} dv' = -\frac{\hbar^2 \varepsilon}{m} \int \Psi_0^{(0)}(r') \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \Psi_0^{(0)}(r') dv'. \quad (1)$$

Для вычисления интеграла, входящего в выражение (1), заметим, что в силу сферической симметрии в. ф. $\Psi_0^{(0)}$

$$\overline{\frac{\partial^2}{\partial x'^2}} = \overline{\frac{\partial^2}{\partial y'^2}} = \overline{\frac{\partial^2}{\partial z'^2}} = \frac{1}{3} \overline{\Delta'}$$

а так как $\Delta' \Psi_0^{(0)} = -\frac{\pi^2}{a^2} \Psi_0^{(0)}$ (*), то

$$E_0^{(1)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 \varepsilon}{3ma^2}, \quad E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 + \frac{2\varepsilon}{3} \right).$$

Учитывая, что объем эллипсоида равен $v = 4\pi a^2 b/3 = 4\pi a^3 (1 + \varepsilon)^{-1}/3 \approx 4\pi a^3 (1 - \varepsilon)/3 \equiv 4\pi R^3/3$, находим $E_0 \approx \approx \hbar^2 \pi^2 / 2mR^2$, где R — радиус шара, имеющего такой же объем, как и эллипсоид. Таким образом, в первом порядке теории возмущений по параметру ε энергия основного состояния частицы определяется лишь объемом эллипсоида.

*) Строго говоря, в правую часть этого соотношения следовало бы ввести дополнительное слагаемое $-\delta(r' - a) \Psi_0^{(0)'}(a)$ (ср. с 2.3); однако учет его не изменяет значения $\overline{\Delta'}$ (так как $\Psi_0^{(0)}(a) = 0$).

8.16. Задача решается аналогично предыдущей. С. ф. и с. з. невозмущенного гамильтониана имеют вид (см. 4.33)

$$\Psi_{n_r l m}^{(0)} = \frac{C}{\sqrt{r}} J_{l+1/2} \left(\alpha_{n_r+1, l} \frac{r}{a} \right) Y_{lm}, \quad E_{n_r l}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \alpha_{n_r+1, l}^2}{2ma^2},$$

и уровень является $(2l + 1)$ -кратно вырожденным. Так как оператор \hat{l}_z коммутирует с гамильтонианом, то, очевидно, правильными функциями нулевого приближения для возмущенного гамильтониана являются приведенные выше в. ф. и для расчета смещения уровня можно воспользоваться формулой

$$E_{n_r l m}^{(1)} = \int \Psi_{n_r l m}^{(0)*} \hat{V} \Psi_{n_r l m}^{(0)} dv = - \frac{\varepsilon \hbar^2}{m} \int \Psi_{n_r l m}^{(0)*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_{n_r l m}^{(0)} dv. \quad (1)$$

Для вычисления интеграла в (1) воспользуемся условным равенством, аналогичным установленному в 3.52 для векторных операторов:

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} = A \delta_{ik} + B \varepsilon_{ikl} \hat{l}_l + C (\hat{l}_i \hat{l}_k + \hat{l}_k \hat{l}_i). \quad (2)$$

Из условия симметрии левой части соотношения (2) по индексам i и k следует $B = 0$, условие $\hat{l}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \equiv 0$ приводит к «равенству»

$$A + C [2l(l + 1) - 1] = 0, \quad (3)$$

а свертка выражения (2) по индексам i и k дает

$$3A + 2l(l + 1)C = \Delta. \quad (4)$$

Из (3) и (4) находим A и C и, учитывая соотношение

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi_{n_r l m}^{(0)*} \Delta \Psi_{n_r l m}^{(0)} dv = E_{n_r l}^{(0)},$$

согласно (1) и (2) получаем

$$E_{n_r l m}^{(1)} = 2\varepsilon E_{n_r l}^{(0)} \frac{(2l^2 + 2l - 1 - 2m^2)}{(2l - 1)(2l + 3)}. \quad (5)$$

Из (5) следует, что $(2l + 1)$ -кратное вырождение уровня частично снимается: он расщепляется на $l + 1$ подуровней, из которых один (с $m = 0$) является невырожденным, а остальные — двукратно вырожденными. В высших порядках теории возмущений дальнейшего снятия вырождения не происходит. Легко найти среднее по всем подуровням значение поправки первого порядка:

$$\overline{E_{n_r l m}^{(1)}} = \frac{1}{2l + 1} \sum_m E_{n_r l m}^{(1)} = \frac{2\varepsilon}{3} E_{n_r l}^{(0)},$$

и среднее значение энергии подуровней в первом порядке по малому параметру ε :

$$\overline{E_{n_r l m}} = E_{n_r l}^{(0)} + \overline{E_{n_r l m}^{(1)}} = \frac{\hbar^2 \alpha_{n_r+1, l}^2}{2mR^2},$$

т. е. $\overline{E_{n_r l m}}$ определяется только объемом эллипсоида ($v = 4\pi R^3/3$).

8.17. При $r \ll a$ потенциал имеет вид $U \approx -U_0 a/r$ (рис. 30). В таком кулоновском поле в. ф. нижних энергетических уровней локализованы на расстоянии порядка $r_n \sim a_0 n^2 \equiv \frac{\hbar^2 n^2}{maU_0}$ от центра поля, и если это расстояние много меньше величины a , т. е.

$$\xi \equiv ma^2 U_0 / \hbar^2 \gg n^2 \quad (1)$$

(n — главное квантовое число в кулоновском поле), то, очевидно, в «нулевом» приближении энергетические уровни нижней части спектра и соответствующие им в. ф. будут иметь вид

$$\Psi_{n_r l m}^{(0)} = \Psi_{n_r l m}^{\text{кул}},$$

$$E_n^{(0)} = -ma^2 U_0^2 / 2\hbar^2 n^2 = -U_0 \xi / 2n^2,$$

где $\Psi_{n_r l m}^{\text{кул}}$ — хорошо известные с. ф. гамильтониана частицы в кулоновском поле $U = -\alpha/r$ с $\alpha = U_0 a$. Отличие рассматриваемого в задаче потенциала от кулоновского играет при этом роль возмущения:

$$V(r) = -U_0 \left[\frac{1}{\exp(r/a) - 1} - \frac{a}{r} \right]. \quad (2)$$

Так как функции $\Psi_{n_r l m}^{(0)}$ являются с. ф. операторов \hat{I}^2 и l_z , коммутирующих с гамильтонианом частицы и при наличии возмущения, то они являются правильными функциями «нулевого» приближения, и поправка первого порядка к энергетическим уровням равна

$$E_{n_r l}^{(1)} = \int V(r) |\Psi_{n_r l m}^{(0)}|^2 dv. \quad (3)$$

Разлагая возмущение (2) в ряд по степеням (r/a) :

$$V(r) = -U_0 \left(-\frac{1}{2} + \frac{r}{12a} + O\left(\frac{r^3}{a^3}\right) \right), \quad (4)$$

и учитывая известное значение интеграла (см., например, [3])

$$\int r |\Psi_{n_r l m}^{(0)}|^2 dv = \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)] \frac{\hbar^2}{maU_0}, \quad (5)$$

находим согласно (3) — (5)

$$E_{n_r, l}^{(1)} = U_0 \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{24\xi} [3n^2 - l(l+1)] \right\}, \quad n = n_r + l + 1. \quad (6)$$

Отметим, что уже учет слагаемого $O(r^3/a^3)$ в формуле (4) при расчете поправки первого порядка к уровням энергии является превышением точности, так как соответствующее слагаемое $O(U_0/\xi^3)$ в выражении для $E^{(1)}$ имеет такой же порядок величины, как и поправка второго порядка теории возмущений.

Как видно из полученного выражения (6), «случайное» вырождение уровней в кулоновском поле под действием возмущения снимается и остается лишь обычное $(2l+1)$ -кратное вырождение (по проекциям момента) уровней в центральном поле

8.18. Задача решается совершенно аналогично предыдущей.

Возмущение имеет вид ($\xi \equiv \alpha am/\hbar^2$)

$$V(r) = U(r) + \frac{\alpha}{r} \approx \frac{\alpha}{a} \left(1 - \frac{r}{2a} \right).$$

Сдвиг уровней в первом порядке теории возмущений равен

$$E_{n_r, l}^{(1)} \approx \frac{\alpha}{a} \left\{ 1 - \frac{1}{4\xi} [3n_r^2 + 6n_r(l+1) + (l+1)(2l+3)] \right\}.$$

Условие применимости: $\xi \gg n^2$.

8.19. В сильном электрическом поле в. ф. нижних уровней ротатора локализованы в области малых углов $|\varphi| \ll 1$, так как при $\varphi=0$ потенциальная энергия $U = -d\mathcal{E}_0 \cos \varphi$ имеет глубокий минимум (рис. 31). Разлагая $U(\varphi)$ в ряд и ограничиваясь первыми членами разложения:

$$U(\varphi) = -d\mathcal{E}_0 \cos \varphi \approx -d\mathcal{E}_0 + \frac{d\mathcal{E}_0}{2} \varphi^2 \quad (|\varphi| \ll 1), \quad (1)$$

приводим в «нулевом» приближении гамильтониан ротатора к гамильтониану линейного осциллятора, и в этом приближении с. ф. и с. з. имеют вид

$$\Psi_n^{(0)}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2^n \sqrt{\pi} \varphi_0^n}} \exp\left(-\frac{\varphi^2}{2\varphi_0^2}\right) H_n\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right), \quad |\varphi| < \pi,$$

$$E_n^{(0)} = -d\mathcal{E}_0 + \hbar \sqrt{d\mathcal{E}_0/l} (n + 1/2); \quad n = 0, 1, \dots, \quad \varphi_0 = \left(\frac{\hbar^2}{l d\mathcal{E}_0}\right)^{1/4}.$$

Условие применимости проведенного рассмотрения состоит в малости с. ф. при $|\varphi| \sim 1$. Так как в. ф. $\Psi_n^{(0)}(\varphi)$ существенно отличны от нуля лишь в области углов

$$d\mathcal{E}_0 \varphi^2 \leq \hbar \omega (n + 1/2), \quad \text{т. е. } \varphi^2 \leq \varphi_0^2 (n + 1),$$

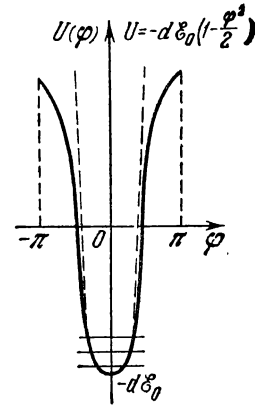


Рис. 31.

то условие применимости полученных результатов принимает вид

$$\varphi_0^2 (n+1) \ll 1, \quad \text{или} \quad \mathcal{E}_0 \gg \frac{\hbar^2}{4I^2} (n+1)^2.$$

Взяв в выражении (1) следующие члены разложения по φ^2 , можно уточнить значения энергетических уровней ротатора. Легко заметить, что поправка первого порядка имеет порядок величины

$$E_n^{(1)} = -\frac{d\mathcal{E}_0}{24} \int \varphi^4 |\Psi_n^{(0)}|^2 d\varphi \sim \frac{-d\mathcal{E}_0}{24} \varphi_0^4 (n+1)^2 = -\frac{\hbar^2 (n+1)^2}{24I}.$$

8.20. Для приближенного решения у. Ш. для «радиальной части» с. ф. гамильтониана $\Psi_{n_r, l m} = R_{n_r, l}(r) Y_{lm}/r$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} R'' - \frac{\alpha}{r^p} R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R = ER,$$

определяющего также энергетический спектр частицы, разложим «эффektivную» потенциальную энергию

$$U_{\text{эфф}} = -\frac{\alpha}{r^p} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

в ряд вблизи точки

$$r_0 = \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\alpha m p} \right]^{\frac{1}{2-p}},$$

в которой $U_{\text{эфф}}$ имеет минимум:

$$U_{\text{эфф}} = -\frac{1}{2} \alpha (2-p) r_0^{-p} + \frac{\alpha (2p-p^2)}{2} r_0^{-(p+2)} (r-r_0)^2 + \dots \quad (1)$$

При $|r-r_0| \ll r_0$ в выражении (1) можно ограничиться лишь первыми двумя слагаемыми, и если в. ф. $R_{n_r, l}(r)$ существенно отличны от нуля лишь в области таких значений переменной r , то для приближенного расчета $R_{n_r, l}$ и уровней энергии $E_{n_r, l}$ мы приходим, фактически, к задаче о гармоническом осцилляторе с точкой равновесия $r=r_0$ и упругостью $k=U''_{\text{эфф}}(r_0)$. При этом

$$R_{n_r, l}^{(0)}(r) = \frac{1}{\sqrt{2^n r_0 a \sqrt{\pi} n_r!}} \exp\left[-\frac{(r-r_0)^2}{2a^2}\right] H_{n_r}((r-r_0)/a),$$

$$E_{n_r, l}^{(0)} = -\frac{\alpha(2-p)}{2} r_0^{-p} + \hbar \sqrt{\frac{\alpha(2p-p^2)}{m} r_0^{-p-2}} (n_r + 1/2), \quad (2)$$

$$a = \left(\frac{\hbar^2 r_0^{p+2}}{m\alpha(2p-p^2)} \right)^{1/4}.$$

Для справедливости полученных выражений (2) требуется выполнение использованного при их получении условия: в. ф.

$R_{n_r l}^{(0)}$ должна быть существенно отлична от нуля лишь при $|r - r_0| \ll r_0$. Учитывая, что в. ф. $R_{n_r l}^{(0)}$ существенно отлична от нуля при

$$\frac{\hbar}{2} (r - r_0)^2 \leq \hbar \omega (n_r + 1/2),$$

находим условие применимости проведенного рассмотрения

$$[l(l+1)]^{1/4} \gg \left(\frac{(n_r + 1)^2}{2 - \rho} \right)^{1/4}, \quad (3)$$

которое при достаточно больших значениях l (и не слишком больших n_r) всегда может быть выполнено (существенно, что $\rho < 2$).

Точная в. ф. $R_{n_r l}$ равна нулю при $r = 0$, в то время как приближенная $R_{n_r l}^{(0)}$ этому точному условию не удовлетворяет. Однако $R_{n_r l}^{(0)}$ при $r = 0$ является экспоненциально малой величиной, так что условие $R_{n_r l}^{(0)}(0) \approx 0$ приближенно выполняется.

В случае кулоновского поля точное значение энергии уровня E_n можно представить в виде ($n = n_r + l + 1$)

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(l + 1/2 + n_r + 1/2)^2} \approx \\ &\approx -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 (l + 1/2)^2} + \frac{m\alpha^2}{\hbar^2 (l + 1/2)^3} (n_r + 1/2), \end{aligned}$$

согласуем с найденным выражением (2) для $E_{n_r l}^{(0)}$ (следует учесть, что согласно (3) $l \gg 1$, так что $l(l+1) \approx (l + 1/2)^2$).

8.21. Задача решается аналогично предыдущей. «Радиальная часть R » с. ф. $\Psi_{n_r m} = R_{n_r m} e^{im\varphi} / \sqrt{\rho}$ гамильтониана поперечного движения и соответствующие уровни энергии находятся из уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2 (m^2 - 1/4)}{2\mu\rho^2} R + 2|\kappa e| \ln \frac{\rho}{a} R = E_l R, \quad (1)$$

в котором κ — линейная плотность заряда нити, $\kappa e < 0$, a — произвольная постоянная. Введем для удобства

$$\tilde{\rho}_0 = \left[\frac{\hbar^2 \rho_0^2}{4\mu |\kappa e|} \right]^{1/4}, \quad \rho_0 = \left(\frac{\hbar^2 (m^2 - 1/4)}{2\mu |\kappa e|} \right)^{1/2}, \quad m \neq 0.$$

Эффективная потенциальная энергия при $m \neq 0$

$$U_{\text{эфф}}(\rho) = 2|\kappa e| \ln \frac{\rho}{a} + \frac{\hbar^2 (m^2 - 1/4)}{2\mu\rho^2}$$

имеет минимум в точке ρ_0 . Вблизи этой точки ($|\rho - \rho_0| \ll \rho_0$)

$$U_{\text{эфф}}(\rho) \approx U_{\text{эфф}}(\rho_0) + \frac{2|\kappa e|}{\rho_0^2} (\rho - \rho_0)^2. \quad (2)$$

В приближении (2) уравнение (1) сводится к у. Ш. для осциллятора и имеет решение

$$R_{n_\rho m}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2^{n_\rho} \sqrt{\pi} \bar{\rho}_0 (n_\rho)!}} \exp \left[-\frac{(\rho - \rho_0)^2}{2\bar{\rho}_0^2} \right] H_{n_\rho} \left(\frac{\rho - \rho_0}{\bar{\rho}_0} \right), \quad (3)$$

$$(E_t^{(0)})_{n_\rho m} = U_{\text{эфф}}(\rho_0) + \sqrt{\frac{8e^2 \kappa^2}{m^2 - 1/4}} (n_\rho + 1/2). \quad (4)$$

В. ф. (3) существенно отлична от нуля лишь при

$$(\rho - \rho_0)^2 \leq (n_\rho + 1/2) \left[\frac{\hbar^2 \rho_0^2}{\mu |\kappa e|} \right]^{1/2} \equiv (n_\rho + 1/2) \left[\frac{2\rho_0^4}{m^2 - 1/4} \right]^{1/2},$$

так что использованное при получении (2) условие $|\rho - \rho_0| \ll \rho_0$ принимает вид $\sqrt{n_\rho + 1/2} \ll \sqrt{|m|}$, чем и определяется область применимости полученного приближенного решения.

8.22. Рассматривая в уравнении (см. 2.57)

$$\Psi_k(x) = e^{ikx} - \frac{im}{|k|\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i|k||x-x'|} U(x') \Psi_k(x') dx' \quad (1)$$

потенциальную энергию как возмущение и представив в. ф. в виде $\Psi_k = \Psi_k^{(0)} + \Psi_k^{(1)}$, легко находим

$$\Psi_k^{(0)} = e^{ikx}, \quad \Psi_k^{(1)} \approx -\frac{im}{|k|\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} U(x') \exp[ikx' + i|k||x-x'|] dx'. \quad (2)$$

При получении соотношений (2) было предположено, что $|\Psi_k^{(1)}| \ll |\Psi_k^{(0)}|$ и выполнение этого неравенства определяет область применимости рассмотрения. Обозначив через a и U_0 радиус и характерную величину потенциала, легко находим оценку величины $|\Psi_k^{(1)}|$ и условие применимости теории возмущений (с учетом $|\Psi_k^{(0)}| = 1$)

$$|\Psi_k^{(1)}| \leq \frac{mU_0 a}{|k|\hbar^2}, \quad \frac{mU_0 a}{|k|\hbar^2} \ll 1.$$

Отметим, что полученная оценка величины $|\Psi_k^{(1)}|$ справедлива при произвольной энергии частицы.

В условиях применимости теории возмущений для коэффициента отражения частиц получается следующее выражение ($E = \hbar^2 k^2 / 2m$):

$$R(E) \approx \frac{m^2}{k^2 \hbar^4} \left| \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx \right|^2 \ll 1, \quad (3)$$

если в соответствующей формуле задачи 2.59 заменить точную в. ф. на приближенную $\Psi_k^{(0)} = \exp(ikx)$.

8.23. Матричные элементы возмущения $\hat{V} = -x F_0 f(t)$ равны (см. задачу 2.1)

$$V_{n0}(t) = -\frac{2}{a} F_0 f(t) \int_0^a x \sin \frac{(n+1)\pi x}{a} \sin \frac{\pi x}{a} dx =$$

$$= \begin{cases} 0, & n - \text{четное } (n \neq 0), \\ \frac{8a(n+1)F_0 f(t)}{\pi^2 n^2 (n+2)^2}, & n - \text{нечетное.} \end{cases}$$

Учитывая значения интегралов ($\omega_{n0} = \hbar\pi^2 n(n+2)/2ma^2$)

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{n0}t - t^2/\tau^2) dt = \sqrt{\pi} \tau \exp(-\omega_{n0}^2 \tau^2/4),$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{n0}t - |t|/\tau) dt = 2\tau (1 + \omega_{n0}^2 \tau^2)^{-1},$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{n0}t) \frac{dt}{1 + (t/\tau)^2} = \pi\tau \exp(-\omega_{n0}\tau)$$

(первый из которых легко сводится к интегралу Пуассона, второй берется элементарно, а последний вычисляется с помощью вычетов), согласно стандартной формуле теории возмущений находим вероятности возбуждения различных состояний частицы (в первом порядке теории возмущений) при $t \rightarrow \infty$ в виде

$$W^{(1)}(0 \rightarrow n) = \begin{cases} 0, & n - \text{четное } (n \neq 0), \\ \frac{64a^2 F_0^2 (n+1)^2}{\pi^4 n^4 (n+2)^4 \hbar^2} I_k^2, & n - \text{нечетное,} \end{cases}$$

где значения $k = 1, 2, 3$ соответствуют трем различным временным зависимостям поля, приведенным в условии задачи. Отметим, что в первом порядке возбуждаются лишь нечетные уровни частицы, причем с ростом n величина $W^{(1)}(0 \rightarrow n)$ быстро уменьшается; так, $W^{(1)}(0 \rightarrow 3)/W^{(1)}(0 \rightarrow 1) < 0,007$. Условие применимости рассмотрения: $ma^3 F_0 \ll \hbar^2 \pi^2$.

8.24. Возмущение имеет вид $\hat{V} = -ex\mathcal{E}(t)$, и его матричные элементы равны (см. 8.3)

$$V_{kn}(t) = -\frac{ea\mathcal{E}(t)}{\sqrt{2}} \cdot \begin{cases} \sqrt{n+1}, & k = n+1, \\ \sqrt{n}, & k = n-1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Отличные от нуля вероятности переходов осциллятора в первом порядке теории возмущений равны

$$W^{(1)}(n \rightarrow k) = \frac{e^2 a^2 |I|^2}{2\hbar^2} \cdot \begin{cases} (n+1), & k = n+1, \\ n, & k = n-1, \end{cases} \quad (1)$$

где $I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) \exp(\pm i\omega t) dt$ (знак « \pm » здесь относится к значениям $k = n+1$ и $k = n-1$ соответственно; величина $|I|^2$ не зависит от этого знака).

Для указанных в условии задачи зависимостей $\mathcal{E}(t)$ величина I равна

$$a) \quad I = \sqrt{\pi\tau} \mathcal{E}_0 \exp\left(-\frac{\omega^2 \tau^2}{4}\right); \quad б) \quad I = \frac{2\tau \mathcal{E}_0}{1 + \omega^2 \tau^2}.$$

Согласно (1) отличны от нуля вероятности переходов осциллятора из n -го состояния лишь в ближайшие по энергии $(n-1)$ - и $(n+1)$ -состояния. Условие применимости рассмотрения: $ea\mathcal{E}_0 \sqrt{n+1} \ll \hbar\omega$.

8.25. В выражении $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0(1 + (t/\tau)^2)^{-1}$ величина \mathcal{E}_0 определяется из условия

$$P_0 = \int_{-\infty}^{\infty} F(t) dt = e \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) dt = e\mathcal{E}_0\pi\tau, \quad \text{т. е. } e\mathcal{E}_0 = P_0/\pi\tau.$$

С учетом значения интеграла (он вычисляется с помощью вычетов)

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{\pm i\omega t} dt = \mathcal{E}_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm i\omega t} \frac{dt}{1 + (t/\tau)^2} = \pi\tau \mathcal{E}_0 e^{-\omega\tau}$$

вероятности переходов осциллятора определяются формулой (1) предыдущей задачи, в которой величина $e^2 |I|^2$ равна

$$e^2 |I|^2 = P_0^2 e^{-2\omega\tau}.$$

Искомые вероятности при фиксированном значении P_0 с ростом τ монотонно убывают и при $\tau = \infty$ равны нулю.

8.26. Возмущение имеет вид $\mathcal{V} = -d\mathcal{E}(t) \cos \varphi$, и его матричные элементы равны (см. 8.9)

$$V_{m'm}(t) = \begin{cases} -d\mathcal{E}(t)/2, & m' = m \pm 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Отличные от нуля вероятности переходов ротатора в первом порядке теории возмущений определяются выражением ($m' = m \pm 1$)

$$W^{(1)}(m \rightarrow m') = \frac{d^2}{4\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) \exp(i\omega_{m'm}t) dt \right|^2. \quad (1)$$

Значения интеграла в формуле (1) для указанных в условии задачи зависимостей $\mathcal{E}(t)$ приведены в решении задачи 8.24 (следует учесть, что величины $\omega_{m'm}$ равны $(2m+1)\hbar/2I$ и $-(2m-1)\hbar/2I$ для $m' = m+1$ и $m' = m-1$ соответственно). Условие применимости полученных результатов: $d\mathcal{E}_0 \ll \ll \hbar^2(|m|+1)/I$.

Из полученного выражения для $W^{(1)}(m \rightarrow m')$ следует, что в первом порядке теории возмущений возбуждаются лишь ближайшие по энергии уровни ротатора.

8.27. Матричные элементы возмущения $\hat{V} = -d\mathcal{E}(t) \cos \theta$ были вычислены в 8.12:

$$V_{l'm', lm}(t) = \delta_{mm'} \cdot \begin{cases} -d\mathcal{E}(t) a_{lm}, & l' = l+1, \\ -d\mathcal{E}(t) b_{lm}, & l' = l-1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Видно, что в первом порядке теории возмущений возбуждаются только состояния ротатора с моментом $l' = l \pm 1$ (при этом проекция момента m на направление поля не изменяется; отсутствие переходов с изменением значения m связано с тем, что проекция момента является интегралом движения). Вероятности указанных переходов:

$$W^{(1)}(l \rightarrow l') = \frac{d^2}{\hbar^2} \begin{cases} |a_{lm} \tilde{I}(\omega_{l+1, l})|^2, & l' = l+1, \\ |b_{lm} \tilde{I}(\omega_{l-1, l})|^2, & l' = l-1, \end{cases} \quad (1)$$

где $\tilde{I}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) \exp(i\omega t) dt$, а частоты переходов $\omega_{l'l}$ равны $\hbar(l+1)/I$ и $-\hbar l/I$ соответственно для $l' = l+1$ и $l' = l-1$. Значения интеграла $\tilde{I}(\omega)$ для временных зависимостей $\mathcal{E}(t)$ вида, приведенного в 8.24, указаны в решении этой задачи.

Условие применимости результата (1): $d\mathcal{E}_0 \ll \hbar^2(l+1)/I$.

8.28. В. ф. $\Psi(t)$ состояния системы с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$, где $\hat{V}(t)$ — зависящее от времени возмущение, представим в виде разложения по с. ф. гамильтониана \hat{H}_0 :

$$\Psi(t) = \sum_m a_m(t) \Psi_m^{(0)} \exp(-iE_m^{(0)}t/\hbar).$$

Из у. Ш. следуют уравнения для коэффициентов разложения:

$$\dot{a}_k(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_m a_m(t) V_{km}(t) \exp(i\omega_{km}^{(0)}t), \quad (1)$$

$$V_{km}(t) = \int \Psi_k^{(0)*} \hat{V}(t) \Psi_m^{(0)} d\tau, \quad \omega_{km}^{(0)} = \frac{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}{\hbar}.$$

Считая, что до включения возмущения (т. е. при $t \rightarrow -\infty$) система находилась в n -м состоянии невозмущенного гамильтониана, т. е. $a_k(t \rightarrow -\infty) = \delta_{kn}$ (в дальнейшем пишем $a_{kn}(t)$)

вместо $a_k(t)$, и рассматривая возмущение как малое, представим $a_k(t)$ в виде ряда по степеням возмущения:

$$a_{kn}(t) = a_{kn}^{(0)} + a_{kn}^{(1)} + \dots = \delta_{kn} + a_{kn}^{(1)}(t) + a_{kn}^{(2)}(t) + \dots \quad (2)$$

В выражении (2) мы учли, что из (1) следует $\dot{a}_{kn}^{(0)} = 0$, т. е. $a_{kn}^{(0)} = \text{const} = \delta_{kn}$. Подставив (2) в (1) и приравнявая в обеих частях равенства члены одинакового порядка малости по возмущению, находим (с учетом равенства $a_{kn}^{(0)} = \delta_{kn}$)

$$\dot{a}_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}^{(0)}t}, \quad \dot{a}_{kn}^{(2)} = -\frac{i}{\hbar} \sum_m V_{km}(t) a_{mn}^{(1)} e^{i\omega_{km}^{(0)}t}. \quad (3)$$

Из (3) следует с учетом начальных условий $a_{kn}^{(1,2)}(t = -\infty) = 0$:

$$\begin{aligned} a_{kn}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{kn}(t') \exp(i\omega_{kn}^{(0)}t') dt', \\ a_{kn}^{(2)}(t) &= \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{-\infty}^t V_{km}(t') \exp(i\omega_{km}^{(0)}t') \int_{-\infty}^{t'} V_{mn}(t'') \exp(i\omega_{mn}^{(0)}t'') dt'' dt'. \end{aligned} \quad (4)$$

Вероятность перехода системы из начального n -го в конечное k -е (после выключения возмущения) состояние равна ($k \neq n$) $W(n \rightarrow k) = |a_{kn}(t = +\infty)|^2 = |a_{kn}^{(1)}(t = \infty) + a_{kn}^{(2)}(t = \infty) + \dots|^2$, и если $a_{kn}^{(1)}(t = +\infty) = 0$, то величина

$$W^{(2)}(n \rightarrow k) = |a_{kn}^{(2)}(t = +\infty)|^2 \quad (5)$$

представляет вероятность перехода системы в соответствующее состояние во втором порядке теории возмущений.

8.29. Парадокс в действительности нет: для вычисления квадрата модуля величины $a = 1 + a^{(1)} + a^{(2)} + \dots$, представляющей разложение в ряд по некоторому малому параметру $\lambda \ll 1$ (так что $|a^{(n)}| \sim \lambda^n$) с точностью до членов второго порядка малости включительно, необходимо знать величину a также с точностью до членов второго порядка. Действительно,

$$|a|^2 = 1 + 2 \operatorname{Re} a^{(1)} + |a^{(1)}|^2 + 2 \operatorname{Re} a^{(2)} + O(\lambda^3); (|a^{(1)}|^2 \sim \operatorname{Re} a^{(2)} \sim \lambda^2).$$

На основании результата предыдущей задачи имеем

$$\begin{aligned} a_{nn}(t = \infty) &\approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{nn}(t) dt - \\ &- \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}^{(0)}t} \int_{-\infty}^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}^{(0)}t'} dt' dt. \end{aligned} \quad (1)$$

Согласно (1) вероятность системе остаться при $t \rightarrow +\infty$ в исходном n -м состоянии с точностью до членов второго порядка малости по возмущению включительно равна

$$\begin{aligned}
W_n^{(2)} = |a_{nn}(t = \infty)|^2 = & 1 + \frac{1}{\hbar^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} V_{nn}(t) dt \right]^2 - \\
& - \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} V_{nm}(t) \exp(i\omega_{nm}^{(0)}t) \int_{-\infty}^t V_{mn}(t') \exp(i\omega_{mn}^{(0)}t') dt' dt - \\
& - \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} V_{nm}^*(t) \exp(-i\omega_{nm}^{(0)}t) \int_{-\infty}^t V_{mn}^*(t') \exp(-i\omega_{mn}^{(0)}t') dt' dt \quad (2)
\end{aligned}$$

(напомним, что $V_{nn}(t)$ — вещественная величина). Учитывая, что $\omega_{kn}^{(0)} = -\omega_{nk}^{(0)}$, $V_{kn}^*(t) = V_{nk}(t)$ (в силу эрмитовости оператора \hat{V}), и свойство интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t dt' f(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{t'}^{\infty} dt f(t, t'),$$

выражение (2) легко преобразовать к виду

$$\begin{aligned}
W_n^{(2)} = & 1 + \frac{1}{\hbar^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} V_{nn}(t) dt \right]^2 - \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}^{(0)}t} dt \right|^2 = \\
= & 1 - \frac{1}{\hbar^2} \sum'_m \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}^{(0)}t} dt \right|^2 = 1 - \sum'_m W^{(1)}(n \rightarrow m), \quad (3)
\end{aligned}$$

где штрих у символа суммы означает отсутствие слагаемого с $m = n$.

Полученное соотношение (3) выражает, очевидно, закон сохранения нормировки в.ф. состояния системы с точностью до членов второго порядка по возмущению включительно.

8.30. Из выражения для амплитуды перехода во втором порядке теории возмущений, установленного в 8.28:

$$a_{kn}^{(2)}(t = \infty) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} V_{km}(t) e^{i\omega_{km}^{(0)}t} \int_{-\infty}^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}^{(0)}t'} dt' dt,$$

с учетом значений матричных элементов возмущения $\hat{V} = -e\chi \mathcal{E}(t)$ для осциллятора, приведенных в решении 8.24, следует, что во втором порядке появляются переходы осциллятора из n -ого в $(n+2)$ -ое и $(n-2)$ -ое состояния, запрещенные в первом порядке (см. 8.24). Учитывая значения $V_{kn}(t)$, легко

находим

$$\begin{aligned} a_{n+2, n}^{(2)}(+\infty) &= -\frac{e^2 a^2 \sqrt{(n+1)(n+2)}}{2\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{i\omega t} \int_{-\infty}^t \mathcal{E}(t') e^{i\omega t'} dt' dt = \\ &= -\frac{1}{4\hbar^2} e^2 a^2 \sqrt{(n+1)(n+2)} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{i\omega t} dt \right]^2 \end{aligned}$$

и, аналогично,

$$a_{n-2, n}^{(2)}(+\infty) = -\frac{e^2 a^2 \sqrt{n(n-1)}}{4\hbar^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{-i\omega t} dt \right]^2.$$

Используя обозначения задачи 8.24: $I(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{i\omega t} dt$,

находим во втором порядке теории возмущений вероятности переходов осциллятора, которые запрещены в первом порядке, в виде

$$W^{(2)}(n \rightarrow m) = |a_{mn}^{(2)}|^2 = \frac{e^4 a^4}{16\hbar^4} \cdot \begin{cases} (n+1)(n+2) |I(\omega)|^4, & m = n+2, \\ n(n-1) |I(-\omega)|^4, & m = n-2. \end{cases}$$

Значения I для некоторых конкретных зависимостей $\mathcal{E}(t)$ приведены в решении задачи 8.24, причем для них $|I| \leq \mathcal{E}_0/\omega$, и сравнение вероятностей переходов, происходящих в первом и втором порядках теории возмущений, дает

$$\frac{W^{(2)}}{W^{(1)}} \sim \frac{e^2 a^2 |I|^2 (n+1)}{\hbar^2} \leq \frac{e^2 a^2 \mathcal{E}_0^2 (n+1)}{\hbar^2 \omega^2} \ll 1$$

в условиях применимости теории возмущений.

8.31. Согласно 8.26 в первом порядке происходят переходы ротатора из основного состояния ($m=0$) лишь в первое возбужденное ($m' = \pm 1$), и для указанной в условии задачи зависимости $\mathcal{E}(t)$ вероятности этих переходов равны

$$W^{(1)}(m=0 \rightarrow m' = \pm 1) = \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2 \tau^2}{4\hbar^2 (1 + \omega_0^2 \tau^2)}, \quad \omega_0 = \frac{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar} = \frac{\hbar}{2I}. \quad (1)$$

Используя выражение для амплитуд перехода во втором порядке, полученное в 8.28, и значения матричных элементов возмущения, приведенные в 8.26, легко находим, что во втором порядке теории возмущений появляются переходы ротатора из основного ($m=0$) во второе возбужденное состояние ($m' = \pm 2$) с амплитудой (сравнить с решением предыдущей задачи)

$$a^{(2)}(0 \rightarrow \pm 2) = -\frac{d^2}{4\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{3i\omega_0 t} \int_{-\infty}^t \mathcal{E}(t') e^{i\omega_0 t'} dt' dt. \quad (2)$$

Для указанного в условии задачи вида $\mathcal{E}(t)$ интеграл в выражении (2) легко вычисляется, и вероятности переходов $(m=0) \rightarrow (m' = \pm 2)$, запрещенных в первом порядке, оказываются равными

$$W^{(2)}(0 \rightarrow \pm 2) = |a^{(2)}|^2 = \frac{d^4 \mathcal{E}_0^4 \tau^4}{64 \hbar^4 (1 + 4\omega_0^2 \tau^2) (1 + 9\omega_0^2 \tau^2)}. \quad (3)$$

Сравнение вероятностей переходов (1) и (3) дает

$$\frac{W^{(2)}}{W^{(1)}} \sim \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2 \tau^2}{16 \hbar^2 (1 + 9\omega_0^2 \tau^2)} \leq \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{150 \hbar^2 \omega_0^2} \ll 1$$

в соответствии с условием применимости теории возмущений.

8.32. Задача решается аналогично предыдущей. В первом порядке теории возмущений возбуждается лишь состояние с $l=1$, $m=0$ с вероятностью

$$W^{(1)}(0, 0 \rightarrow 1, 0) = \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2 \tau^2}{3 \hbar^2 (1 + \omega_0^2 \tau^2)}, \quad \omega_0 = \frac{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar} = \frac{\hbar}{I}.$$

Во втором порядке появляется переход в состояние с $l=2$, $m=0$ с вероятностью

$$W^{(2)}(0, 0 \rightarrow 2, 0) = \frac{4d^4 \mathcal{E}_0^4 \tau^4}{45 \hbar^4 (1 + 4\omega_0^2 \tau^2) (4 + 9\omega_0^2 \tau^2)}.$$

8.33. В выражении для в. ф. вида $\Psi(t) = \sum_k a_{kn}(t) \Psi_k^{(0)} e^{-i\omega_k^{(0)} t}$ коэффициенты $a_{kn}(t)$ при $t > 0$ равны (см. 8.28, $k \neq n$)

$$\begin{aligned} a_{kn}(t) &\approx a_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} (V_0)_{kn} \int_0^t \sin(\omega_0 t) \exp(i\omega_{kn}^{(0)} t) dt = \\ &= \frac{-i}{2\hbar} (V_0)_{kn} \left[\frac{1 - \exp[i(\omega_0 + \omega_{kn}^{(0)})t]}{\omega_0 + \omega_{kn}^{(0)}} + \frac{1 - \exp[i(\omega_{kn}^{(0)} - \omega_0)t]}{\omega_0 - \omega_{kn}^{(0)}} \right]. \quad (1) \end{aligned}$$

Из выражения (1) видно, что условием применимости теории возмущений $|a_{kn}^{(1)}| \ll 1$ является выполнение неравенства

$$|(V_0)_{kn}| \ll \hbar |\omega_0 - |\omega_{kn}^{(0)}|| \equiv \hbar \varepsilon_{kn}, \quad (2)$$

которое при условии близости ω_0 к одной из частот перехода $\omega_{kn}^{(0)}$ (так что $\varepsilon_{kn} \ll |\omega_{kn}^{(0)}|$) существенно ограничивает применимость теории возмущений. Напомним, что возмущение \hat{V}_0 в рамках стационарной теории возмущений можно рассматривать как малое при условии

$$|(V_0)_{kn}| \ll \hbar |\omega_{kn}^{(0)}|. \quad (3)$$

Отметим, что в случае возмущения, удовлетворяющего условиям (3), но нарушающего (2), можно получить приближенный вид в. ф. (см., например, [3]); при этом выражение (1) определяет временную зависимость в. ф. при $t \leq T$, где значение T ограничено неравенствами $T\varepsilon_{kn} \ll 1$, $T|(V_0)_{kn}| \ll \hbar$, вытекающими из (1), если потребовать $|a_{kn}^{(1)}| \ll 1$.

8.34. Если бы рассматриваемое n -е состояние относилось к невырожденному уровню, то в случае возмущения, удовлетворяющего условию

$$|V_0|_{kn} \ll \hbar|\omega_{nk}|, \quad k \neq n,$$

переходы системы из n -го состояния были бы малы и в. ф. $\Psi(t)$ в первом порядке теории возмущений определялась бы стандартными формулами (случай резонансного периодического возмущения, обсуждавшийся в предыдущей задаче, мы не рассматриваем). Ситуация несколько изменяется в случае, когда n_1 -е состояние относится к вырожденному уровню: хотя переходы системы в состояния, отличающиеся от исходного по энергии, малы, переходы между состояниями, относящимися к рассматриваемому вырожденному уровню, могут происходить с вероятностью порядка единицы, и задача состоит в приближенном вычислении в. ф. с учетом этих переходов.

Представив приближенно в. ф. в виде $\Psi(t) \approx [a_1\Psi_1^{(0)} + a_2\Psi_2^{(0)}]e^{-i\omega t}$ (мы пишем для краткости a_1 вместо a_{n_1} и т. д.), имеем, как обычно, систему уравнений для коэффициентов $a_i(t)$:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{a}_1 &\approx V_{11}a_1 + V_{12}a_2 = V_0f(t)a_2, \\ i\hbar\dot{a}_2 &\approx V_{21}a_1 + V_{22}a_2 = V_0f(t)a_1. \end{aligned} \quad (1)$$

Из (1) следует

$$\frac{d}{dt}(a_1 \pm a_2) = \mp \frac{i}{\hbar} V_0f(t)(a_1 \pm a_2). \quad (2)$$

Уравнения (2) легко решить. С учетом начальных условий $a_1(-\infty) = 1$, $a_2(-\infty) = 0$ находим

$$a_1(t) = \cos \xi(t), \quad a_2(t) = -i \sin \xi(t), \quad \xi(t) = \frac{V_0}{\hbar} \int_{-\infty}^t f(t) dt. \quad (3)$$

Из выражений (3) следует, что если возмущение действует достаточно длительное время T , так что $|\xi(t)| \leq |V_0|T/\hbar \geq 1$, то, действительно, переходы между состояниями n_1 и n_2 существенны, и это обстоятельство необходимо иметь в виду при расчете переходов системы в состояния, отличающиеся от рассматриваемых по энергии (в рамках стандартных формул нестационарной теории возмущений считается $a_{n_1} \approx 1$, и, как видно из проведенного рассмотрения, при наличии вырождения это справедливо при выполнении условия $|V_{nn'}|T \ll \hbar$).

8.35. Сначала вычислим вероятность перехода (в единицу времени) частицы из состояния д. с. в состояния непрерывного спектра под действием периодического возмущения частоты ω_0 по стандартной формуле [3]

$$\omega = \int d\omega_\nu = \frac{2\pi}{\hbar} \int |F_{\nu n}|^2 \delta(E_\nu - E_n^{(0)} - \hbar\omega_0) d\nu, \quad (1)$$

где оператор \hat{F} входит в оператор периодического возмущения:

$$\hat{V} = -xF_0 \sin \omega_0 t \equiv \hat{F}e^{-i\omega_0 t} + \hat{F}^+ e^{i\omega_0 t},$$

так что в рассматриваемой задаче $\hat{F} = -ixF_0/2$. В. ф. Ψ_n в матричном элементе (n — набор квантовых чисел, определяющих в. ф. д. с.)

$$F_{\nu n} = \int \Psi_\nu^* \hat{F} \Psi_n d\tau \quad (\tau \equiv x)$$

соответствует в. ф. $\Psi_0(x)$ единственного состояния д. с. в поле δ -функциональной ямы ($E_n^{(0)} \equiv E_0$ — энергия этого состояния):

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa} \exp(-\kappa|x|), \quad E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}, \quad \kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2}. \quad (2)$$

Под ν — набором величин, определяющих в. ф. стационарных состояний непрерывного спектра для невозмущенного гамильтониана, — будем понимать волновой «вектор» $k = p/\hbar$ частиц, «падающих» на яму; при этом в качестве Ψ_ν следует взять в. ф. $\Psi_k(x)$, описывающие процесс прохождения и отражения частиц с импульсом $p = \hbar k$ (вид этих функций обсуждался в 2.47), причем если эти функции выбрать нормированными на δ -функцию по k , то $d\nu \equiv dk$: $E_\nu = \hbar^2 k^2/2m$.

С учетом сказанного выше в выражении (1) можно выполнить интегрирование по ν (т. е. по k):

$$\omega = \frac{2\pi}{\hbar} (|F_{k,0}|^2 + |F_{k,0}|^2) \left| \frac{dk}{dE_\nu} \right|, \quad k_{1,2} = \pm \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\hbar\omega_0 + E_0)}. \quad (3)$$

Так как в матричные элементы в выражении (3) входят в. ф. $\Psi_k(x)$, отвечающие значениям k , удовлетворяющим неравенству $|k_{1,2}|\hbar^2 \gg m\alpha$, при котором потенциальную энергию можно рассматривать как возмущение, то в качестве в. ф. $\Psi_k(x)$ можно выбрать в. ф. свободных частиц:

$$\Psi_k(x) = (2\pi)^{-1/2} \exp(ikx).$$

Учитывая явный вид в. ф. и возмущения, находим

$$F_{k0} = -\frac{iF_0 \sqrt{\kappa}}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp(-\kappa|x| - ikx) dx = -\frac{\sqrt{2} k \kappa^{3/2} F_0}{\sqrt{\pi} (\kappa^2 + k^2)^2}, \quad (4)$$

$$\omega = \frac{2\hbar F_0^2 |E_0|^{3/2} \sqrt{\hbar\omega_0 - |E_0|}}{m(\hbar\omega_0)^4}. \quad (5)$$

Искомая вероятность W_0 связана с ω следующим образом:
 $W_0(t) = \exp(-\omega t)$.

8.36. Выражение (5) для вероятности ω , полученное в предыдущей задаче формально при условии $\hbar\omega_0 \gg |E_0|$ (при этом вместо точных в.ф. непрерывного спектра были использованы в.ф. свободных частиц), на самом деле справедливо при произвольной частоте внешнего поля ($\hbar\omega_0 > |E_0|$). Действительно, изменим способ описания состояний частицы в непрерывном спектре: воспользуемся в.ф. $\Psi_{k,\pm}(x)$, являющимися с.ф. гамильтониана и имеющими определенную четность (± 1) ($k = \pm \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$, в то время как в предыдущей задаче $-\infty < k < +\infty$). Явный вид в.ф. четных состояний нам не потребуется, так как для соответствующих функций матричный элемент возмущения тождественно равен нулю, а в.ф. нечетных состояний в случае δ -функционального потенциала такие же, как и для свободных частиц, т. е.

$$\Psi_{k,-}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin kx.$$

Под ν теперь следует понимать набор (k, g) , где $g = \pm$, а «интегрирование» по ν означает интегрирование по k и суммирование по индексу g . Учитывая сказанное выше, легко находим

$$F_{k+,0} \equiv 0, \quad F_{k-,0} = \sqrt{2i} F_{k0},$$

где F_{k0} дается выражением (4) предыдущей задачи, и приходим к вероятности ω , определяемой формулой (5).

При $\hbar\omega_0 < |E_0|$ рассчитываемая вероятность ω , очевидно, равна нулю. Это не означает, что переходы частицы в состояния непрерывного спектра вообще отсутствуют: они происходят в высших порядках теории возмущений, т. е. с существенно меньшей вероятностью. Так, при $|E_0|/2 < \hbar\omega_0 < |E_0|$ вероятность ω отлична от нуля во втором порядке.

8.37. В стандартной формуле теории переходов в непрерывном спектре [3]

$$d\omega_{\nu,\nu} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\nu\nu_0}|^2 \delta(E_\nu - E_{\nu_0}) d\nu, \quad \nu \neq \nu_0, \quad (1)$$

в качестве ν , ν_0 выбираем волновые «векторы» свободных частиц; соответствующие в.ф.

$$\Psi_k(x) = \sqrt{\frac{m}{\hbar k}} e^{ikx}, \quad \Psi_{k'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik'x}$$

нормированы на единичную плотность потока для «падающих» частиц с импульсом $p = \hbar k$ и на δ -функцию по k' для «рассеянных» (отраженных), при этом $d\nu \equiv dk'$. Выполнив в выражении (1) интегрирование по ν (т. е. по k'), находим вероятность пере-

ходов в виде

$$W(k \rightarrow k' = -k) = \frac{m^2}{\hbar^4 k^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx \right|^2, \quad (2)$$

т. е. переходы происходят только в состояния частицы с $k' = -k$, отвечающие отраженным частицам, и выражение (2) представляет коэффициент отражения частиц R .

Обозначив через a , U_0 радиус действия и характерную величину потенциала, в случае $ka \leq 1$ (не очень быстрые частицы) согласно (2) имеем оценку $W \sim m^2 U_0^2 a^2 / \hbar^4 k^2$. Малость величины \sqrt{W} (грубо говоря, амплитуды перехода) по сравнению с единицей определяет условие применимости теории возмущений:

$$ma|U_0| \ll \hbar^2 k^2.$$

8.38. Учитывая известное выражение для коэффициентов $a(t)$ в разложении в. ф. $\Psi(t) = \sum_k a_{kn}(t) \Psi_k^{(0)} e^{-i\omega_k t}$ (см., например, 8.28):

$$\begin{aligned} a_{kn}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} dt = \\ &= \frac{1}{\hbar\omega_{kn}} \int_{-\infty}^t e^{i\omega_{kn}t} \frac{\partial V_{kn}}{\partial t} dt - \frac{V_{kn}(t)}{\hbar\omega_{kn}} e^{i\omega_{kn}t}, \quad V_{kn}(-\infty) = 0 \end{aligned}$$

(в выражении для $a_{kn}^{(1)}$ выполнено интегрирование по частям), находим при $t > 0$:

$$a) \quad a_{kn}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar\omega_{kn}} (V_0)_{kn} - \frac{1}{\hbar\omega_{kn}} (V_0)_{kn} e^{i\omega_{kn}t} \quad (1)$$

(при интегрировании было учтено, что $d\eta(t)/dt = \delta(t)$).

Используя полученное значение (1) коэффициентов $a^{(1)}$, представим в. ф. $\Psi(t)$ в виде (напомним, что $a_{nn}(t) \approx a_{nn}^{(0)} = 1$)

$$\Psi(t) = \left(\Psi_n^{(0)} - \sum_{k \neq n} \frac{(V_0)_{kn}}{\hbar\omega_{kn}} \Psi_k^{(0)} \right) e^{-i\omega_n t} + \sum_{k \neq n} \frac{1}{\hbar\omega_{kn}} (V_0)_{kn} \Psi_k^{(0)} e^{-i\omega_k t},$$

из которого следует, что вероятность перехода $W^{(1)}(n \rightarrow k)$ определяется квадратом модуля первого слагаемого в выражении (1), т. е.

$$\omega^{(1)}(n \rightarrow k) = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{kn}^2} |(V_0)_{kn}|^2, \quad k \neq n, \quad (2)$$

в то время как второе слагаемое в этом выражении определяет изменение в. ф. n -го стационарного состояния системы при $t > 0$ под действием возмущения V_0 .

$$б) \quad \omega^{(1)}(n \rightarrow k) = \frac{1}{\hbar^2} |(W_0)_{kn}|^2, \quad k \neq n. \quad (3)$$

Если возмущение включается за время τ , то формулы (2) и (3) определяют вероятности переходов, для которых $|\omega_{kn}|\tau \ll 1$.

8.39. Обозначим через H_0 и $\hat{H} = H_0 + V_0$ гамильтонианы системы при $t < 0$ и $t > 0$ соответственно (они не зависят от времени!); Ψ_n и $\tilde{\Psi}_n$ — с. ф. этих гамильтонианов. В. ф. системы при $t < 0$ имеет вид $\Psi(t) = \Psi_n \exp(-iE_n t/\hbar)$; такой же вид она имеет и в первые моменты времени после включения возмущения V_0 (не обязательно малого), так как под действием ограниченного воздействия V_0 в. ф. не успевает измениться за бесконечно малый промежуток времени его включения (сравнить с результатом следующей задачи), как это следует из у. Ш. В дальнейшем при $t > 0$ временная зависимость в. ф. определяется гамильтонианом \hat{H} и имеет вид

$$\Psi(t) = \sum_k a_{kn} \tilde{\Psi}_k e^{-i\tilde{E}_k t/\hbar}, \quad a_{kn} = \int \tilde{\Psi}_k^* \Psi_n d\tau.$$

Коэффициенты a_{kn} в этом разложении в. ф. определяют амплитуды рассматриваемых переходов, так что вероятность перехода равна $w(n \rightarrow k) = |a_{kn}|^2$. В случае малости возмущения V_0 гамильтониана (в смысле применимости стационарной теории возмущений), учитывая приближенный вид в. ф. $\tilde{\Psi}_k$, приведенный, например, в условии задачи 8.8, непосредственно приходим к формуле (2) предыдущей задачи.

8.40. Для определения изменения в. ф. под влиянием δ -функционального воздействия будем рассматривать последнее как предельный переход при $\tau \rightarrow 0$ в возмущении вида $\hat{V}(t, \tau) = \hat{W}_0 f(t/\tau)/\tau$, где функция $f(y)$ обладает свойствами

$$f(y) = 0 \quad \text{при } |y| \geq 1; \quad \int_{-1}^1 f(y) dy = 1.$$

У. Ш. принимает вид (мы опускаем слагаемое H_0 в гамильтониане, так как нас интересует изменение в. ф. в течение бесконечно малого промежутка времени 2τ ($\tau \rightarrow 0$))

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{\tau} \hat{W}_0 f(t/\tau) \Psi, \quad |t| < \tau,$$

и решение этого уравнения определяет при $\tau \rightarrow 0$ изменение в. ф. за бесконечно малое время включения и выключения δ -функционального воздействия:

$$\Psi(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{W}_0 \int_{-1}^{t/\tau} f(y) dy \right] \Psi(-\tau), \quad (1)$$

$$\Psi(t=0+) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{W}_0} \Psi(t=0-).$$

Так как в. ф. рассматриваемой системы при $t < 0$ имеет вид $\Psi = \Psi_n^{(0)} \exp(-iE_n t/\hbar)$, то сразу после окончания δ -функционального воздействия она, согласно (1), равна

$$\Psi(t=0+) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{W}_0\right) \Psi_n^{(0)},$$

и по общим принципам вероятности возбуждения различных стационарных состояний при $t > 0$ даются выражением

$$\omega(n \rightarrow k) = \left| \int \Psi_k^{(0)*} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{W}_0\right) \Psi_n^{(0)} d\tau \right|^2. \quad (2)$$

В случае малого возмущения $|(W_0)_{kn}| \ll \hbar$, разлагая в формуле (2) экспоненту в ряд и ограничиваясь первыми двумя членами разложения, получаем результат задачи 8.38, б).

Воздействие вида $V(x, t) = -xP_0\delta(t)$ на классическую частицу состоит в мгновенном сообщении ей импульса $P_0 = \int F(t) dt$. Согласно (1) это утверждение остается справедливым и в квантовой механике. Действительно, сравним в. ф. состояний частицы в импульсном представлении непосредственно до и после воздействия:

$$\begin{aligned} \Psi(t=0-) &= \int a(p) \Psi_p(x) dp, & \Psi(t=0+) &= \int b(p) \Psi_p(x) dp = \\ &= e^{iP_0 x/\hbar} \int a(p) \Psi_p(x) dp \equiv \int a(p) \Psi_{p+P_0}(x) dp = \int a(p-P_0) \Psi_p(x) dp, \end{aligned}$$

т. е. $b(p) = a(p - P_0)$.

8.41. Решение задачи получается по общей формуле для переходов, приведенной в 8.39:

$$\begin{aligned} \omega(0 \rightarrow k) &= \left| \int \tilde{\Psi}_k^* \Psi_0 d\tau \right|^2 = \frac{4}{ab} \left| \int_0^a \sin \frac{\pi(k+1)x}{b} \sin \frac{\pi x}{a} dx \right|^2 = \\ &= \frac{4ab^3}{\pi^2 [a^2(k+1)^2 - b^2]^2} \sin^2 \frac{\pi(k+1)a}{b}. \end{aligned}$$

Условие применимости: $\tau \hbar \pi^2 (k+1)^2 / ma^2 \ll 1$.

8.42. В. ф. единственного состояния д. с. в мелкой яме и его энергия (а также в. ф. нижних стационарных состояний непрерывного спектра) почти такие же, как в случае δ -функционального потенциала $U(x) = -\alpha\delta(x)$ с $\alpha = aU_0$ (см. 2.8 и 2.11), и удобно изменить из точного решения для этого потенциала. Указанное изменение ширины ямы эквивалентно замене параметра α на $\tilde{\alpha} = \alpha b/a$.

Вероятность вылета частицы из ямы равна $\omega = 1 - \omega_0$, где ω_0 — вероятность частице остаться связанной; последнюю легко найти по общей формуле, приведенной в 8.39, если воспользо-

ваться видом в. ф. состояния д. с. в δ -функциональной яме (см. 2.11) :

$$w_0 \equiv w(0 \rightarrow 0) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\kappa + \bar{\kappa})|x|} dx \right|^2 \kappa \bar{\kappa} = \frac{4\kappa \bar{\kappa}}{(\kappa + \bar{\kappa})^2} = \frac{4ab}{(a+b)^2}.$$

Далее, найдем среднюю энергию частицы при $t > 0$. Для этого усредним гамильтониан $\hat{H} = \hat{p}^2/2m - \bar{\alpha}\delta(x)$ по состоянию с в. ф. $\Psi_0(x)$:

$$\begin{aligned} \bar{E}(t > 0) &= \int \Psi_0^* \hat{H} \Psi_0 dx = \bar{H}_0 - \overline{(\bar{\alpha} - \alpha) \delta(x)} = \\ &= E_0 - \frac{\alpha - \bar{\alpha}}{a} 2E_0 = (2b/a - 1) E_0. \end{aligned} \quad (1)$$

Среднюю энергию \bar{e} частиц, покидающих яму, легко найти из очевидного представления $\bar{E}(t > 0)$ в виде

$$\bar{E}(t > 0) = w_0 E_0(b) + (1 - w_0) \bar{e}, \quad E_0(b) = \frac{b^2}{a^2} E_0. \quad (2)$$

Из (1) и (2) следует

$$\bar{e} = (1 + 2b/a) |E_0| = (1 + 2b/a) \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (3)$$

Если $b = 0$, то при $t > 0$ частица становится свободной и ее средняя энергия, равная согласно (3) $|E_0|$, совпадает со средней кинетической энергией в исходном состоянии (при $t < 0$), как и следовало ожидать.

8.43. Задача полностью аналогична предыдущей. Изменение глубины мелкой ямы в n раз приводит к таким же последствиям, как и изменение в n раз ее ширины. Таким образом, решение задачи получается непосредственно из решения предыдущей заменой величины b/a на n .

8.44. Общее выражение для вероятностей переходов при внезапных воздействиях, приведенное в решении задачи 8.39, в случае переходов в состояния непрерывного спектра модифицируется очевидным образом:

$$dw_{nv} = \left| \int \tilde{\Psi}_v^* \Psi_n d\tau \right|^2 dv.$$

В условиях рассматриваемой задачи под v следует понимать импульс p частицы, а в роли $\tilde{\Psi}_v$ выступают, соответственно, с. ф. импульса

$$\Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipx/\hbar).$$

Учитывая вид в. ф. основного состояния в δ -функциональной яме (см. 2.11), легко находим, что в принятом приближении вероятность вылета частицы из ямы с импульсом в интервале $(p, p + dp)$ дается выражением

$$dw(p) = \frac{2\kappa^3 \hbar^3 dp}{\pi(p^2 + \kappa^2 \hbar^2)^2}, \quad \kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2}. \quad (1)$$

Эта вероятность нормирована на единицу, т. е. в рассматриваемом приближении вероятность частице остаться связанной ямой пренебрежимо мала. Как видно из (1), характерная величина импульса вылетающих частиц порядка $p \sim \kappa \hbar \sim m\alpha/\hbar$. Условие применимости полученного выражения (1) состоит в том, чтобы такие частицы можно было рассматривать как свободные, т. е. пренебречь потенциалом $U(x) = -\tilde{\alpha} \delta(x)$. Согласно 8.22 (или 8.37) для этого требуется выполнение неравенства $m\tilde{\alpha} \ll \ll p\hbar$, т. е. $\tilde{\alpha} \ll \alpha$ (в случае δ -функционального потенциала $aU_0 = = \tilde{\alpha}$). Как следует из результата предыдущей задачи, при этом действительно вероятность частице остаться связанной ямой мала.

8.45. Для расчета искомой вероятности перейдем в систему координат K' , движущуюся вместе с ямой, $x' = x - Vt$. В. ф. частицы непосредственно до и после начала движения ямы в исходной системе координат имеет вид (см. 2.11)

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa} \exp(-\kappa|x|), \quad \kappa = m\alpha/\hbar^2. \quad (1)$$

В. ф. этого состояния частицы в системе координат K' связана с в. ф. (1) следующим образом:

$$\tilde{\Psi}_0(x') = \exp\left(-\frac{imVx'}{\hbar}\right) \Psi_0(x') \quad (2)$$

(соотношение (2) выражает тот факт, что преобразование в. ф. состоит в замене импульса p на $p - mV$, его формальное обоснование основано на результате задачи 7.26 при $t = t' = 0$).

Так как в. ф. связанного состояния частицы в системе K' имеет вид (1) с заменой x на x' , то искомая вероятность равна

$$\begin{aligned} w &= \left| \int \Psi_0^*(x') \tilde{\Psi}_0(x') dx' \right|^2 = \\ &= \kappa^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-2\kappa|x| - \frac{imVx}{\hbar}\right] dx \right|^2 = \frac{1}{\left[1 + \frac{V^2\hbar^2}{4\alpha^2}\right]^2}. \end{aligned}$$

8.46. Учитывая вид с. ф. осциллятора (см. 2.6), находим согласно общей формуле для переходов, полученной в 8.39,

$$\begin{aligned} w(0 \rightarrow n) &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^{\text{ocu}*}(x - e\mathcal{E}/k) \Psi_0^{\text{ocu}}(x) dx \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2^n n!} \left| \int_{-\infty}^{\infty} H_n\left(\frac{y}{a}\right) \exp\left[-\frac{y^2}{2a^2} - \frac{(y+x_0)^2}{2a^2}\right] \frac{dy}{a} \right|^2, \quad (1) \\ y &\equiv x - \frac{e\mathcal{E}}{k} \equiv x - x_0. \end{aligned}$$

Интеграл в выражении (1) был вычислен в 7.18. Итак,

$$w(0 \rightarrow n) = \frac{1}{n!} \left(\frac{x_0^2}{2a^2} \right)^n \exp \left(-\frac{x_0^2}{2a^2} \right) \quad \left(x_0 = \frac{e\mathcal{E}}{k} \right).$$

8.47. Задача решается аналогично 8.45. Учитывая в выражении

$$w(0 \rightarrow n) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^{\text{осц}*}(x) \exp \left(-\frac{imVx}{\hbar} \right) \Psi_0^{\text{осц}}(x) dx \right|^2$$

явный вид с. ф. осциллятора и значение интеграла, вычисленного в 7.18, получаем

$$w(0 \rightarrow n) = \frac{1}{n!} \left(\frac{m^2 V^2 a^2}{2\hbar^2} \right)^n \exp \left(-\frac{m^2 V^2 a^2}{2\hbar^2} \right).$$

8.48. Представим в. ф. $\Psi(q, t)$ в виде

$$\Psi(q, t) = \sum_n C_n(t) \Psi_n(q, t) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \right), \quad (1)$$

где $\Psi_n(q, t)$, $E_n(t)$ — с. ф. и с. з. «мгновенного» гамильтониана, т. е.

$$\hat{H}(\rho, q, \lambda(t)) \Psi_n(q, t) = E_n(t) \Psi_n(q, t), \quad (2)$$

а коэффициенты $C_n(t)$ представляют в. ф. системы в требуемом представлении. Подставив в нестационарное у. Ш. в. ф. (1), умножим обе части этого уравнения слева на $\Psi_k^*(t)$ и проинтегрируем по координатам системы q . Учитывая ортогональность в. ф. $\Psi_n(t)$, легко находим у. Ш. в рассматриваемом представлении:

$$\dot{C}_k(t) = - \sum_n C_n(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t (E_k - E_n) dt' \right] \int \Psi_k^* \dot{\Psi}_n dq. \quad (3)$$

Это уравнение в случае, когда спектр оператора \hat{H} является невырожденным, удобно преобразовать следующим образом. Во-первых, выберем $\Psi_n(t)$ вещественными (это всегда можно сделать, если отсутствует магнитное поле, так что $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + U(q, \lambda(t))$). При этом

$$\int \Psi_n^* \dot{\Psi}_n dq = \frac{d}{2dt} \int \Psi_n^2 dq = 0.$$

Во-вторых, продифференцируем по t соотношение (2), умножим обе части равенства на Ψ_k^* с $k \neq n$ и проинтегрируем по координатам системы. В результате легко получим

$$\int \Psi_k^* \dot{\Psi}_n dq = -\frac{1}{E_k - E_n} \int \Psi_k \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right) \Psi_n dq \quad (k \neq n),$$

и уравнение (3) принимает вид

$$\dot{C}_k(t) = \sum'_n \frac{1}{\hbar \omega_{kn}(t)} C_n(t) \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right)_{kn} \exp \left[i \int_0^t \omega_{kn}(t') dt' \right], \quad (4)$$

где штрих у суммы означает отсутствие слагаемого с $n = k$, $\hbar \omega_{kn} = E_k - E_n$, $(\partial \hat{H} / \partial t)_{kn}$ — матричные элементы оператора $\partial \hat{H} / \partial t$.

8.49. Если производная $\partial \hat{H} / \partial t$ достаточно мала (см. ниже), то из уравнения (4) предыдущей задачи следует $\dot{C}_k \approx 0$, т. е. $C_k \approx C_{kn}^{(0)} = \text{const} = \delta_{kn}$ по условию задачи. В следующем приближении адиабатической теории возмущений для $k \neq n$ имеем

$$\dot{C}_{kn}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar \omega_{kn}(t)} \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right)_{kn} \exp \left(i \int_0^t \omega_{kn}(t') dt' \right). \quad (1)$$

Интегрируя (1) при заданном начальном условии, получаем

$$C_{kn}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{1}{\omega_{kn}(t')} \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t'} \right)_{kn} \exp \left(i \int_0^{t'} \omega_{kn}(t'') dt'' \right) dt' \quad (k \neq n). \quad (2)$$

Как следует из вывода, необходимым условием справедливости выражений (2) является неравенство $|C_{kn}^{(1)}| \ll 1$ ($k \neq n$). Оценка $C_{kn}^{(1)}$ согласно (2) дает

$$|C_{kn}^{(1)}| \sim \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \frac{1}{\omega_{kn}} \right| / |E_k - E_n|.$$

Справа стоит отношение изменения гамильтониана за время порядка боровского периода ω_{kn}^{-1} к разности энергий соответствующих уровней, и малость этого отношения представляет искомое условие применимости адиабатической теории возмущений.

Полезно иметь в виду следующее. Несмотря на медленное изменение гамильтониана (в указанном выше смысле), за достаточно длительное время он может измениться очень существенно (даже не иметь ничего общего с первоначальным). Тем не менее система с подавляющей вероятностью в произвольный момент времени будет находиться в состоянии $\Psi_n(t)$. Наглядно этот результат можно сформулировать как сохранение номера (в порядке возрастания энергии) квантового состояния, что представляет обобщение закона сохранения энергии для не зависящего от времени гамильтониана на случай его адиабатического изменения.

Полученный результат о (приближенном) сохранении номера квантового состояния является квантовомеханическим аналогом сохранения адиабатического инварианта $(I = \frac{1}{2\pi} \oint p dq)$ в

классической механике (см. [4]). Последнее обстоятельство становится особенно наглядным в квазиклассическом случае (см. следующую главу), если иметь в виду правило квантования Бора — Зоммерфельда.

8.50. Задача решается с помощью общих результатов адиабатической теории возмущений, изложенных в двух предыдущих задачах.

С. ф. и с. з. «мгновенного» гамильтониана $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + kx^2/2 - ex\mathcal{E}(t)$ были найдены в 2.6:

$$\Psi_n(x, t) = \Psi_n^{\text{оч}}(x - e\mathcal{E}(t)/k), \quad E_n(t) = \hbar\omega(n + 1/2) - e^2\mathcal{E}^2(t)/2k.$$

Оператор $\partial\hat{H}/\partial t$ равен $-ex\dot{\mathcal{E}}(t)$, и его матричные элементы $(\partial\hat{H}/\partial t)_{k0}$ отличны от нуля (при $k \neq 0$) лишь в случае $k = 1$ (см. 8.3), причем $(\partial\hat{H}/\partial t)_{10} = -ea\dot{\mathcal{E}}/\sqrt{2}$. С учетом сказанного общая формула (2) предыдущей задачи для адиабатических переходов принимает вид

$$C_{10}^{(1)}(t = +\infty) = -\frac{ea}{\sqrt{2}\hbar\omega} e^{i\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial t} e^{i\omega t} dt \quad (1)$$

(мы заменили нижние пределы интегрирования $t'' = 0$ на $t'' = -\infty$, так как по условию задачи начальное состояние осциллятора задано при $t \rightarrow -\infty$, и по той же причине положили $t = +\infty$).

Фазовый множитель $\exp(i\infty)$ появился в результате интегрирования

$$i \int_{-\infty}^t \omega_{10} dt = i\omega \int_{-\infty}^t dt = i\omega t + i\omega\infty.$$

Формально его происхождение связано с тем обстоятельством, что мы считали $\Psi(t = -\infty)$ равной $\Psi_0^{\text{оч}}(x)$ — в. ф. начального состояния осциллятора, при этом фаза в. ф. при $t \approx 0$, когда включается поле, бесконечна (так как, грубо говоря, $\Psi(t) \sim \exp(-iEt/\hbar)$).

Квадрат модуля амплитуды перехода (1) определяет вероятность единственного разрешенного в первом порядке адиабатической теории возмущений перехода осциллятора $W(0 \rightarrow 1)$. Если электрическое поле при $t \rightarrow +\infty$ выключается, то интегрированием по частям в выражении (1) вероятность перехода можно преобразовать к виду

$$W(0 \rightarrow 1) = \frac{e^2 a^2}{2\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) \exp(i\omega t) dt \right|^2,$$

аналогичному полученному ранее (см. 8.24) в рамках обычной нестационарной теории возмущений (однако у этих формально одинаковых выражений различные условия применимости *).

Окончательные выражения для вероятностей возбуждений $((\omega\tau \gg 1))$:

$$a) W(0 \rightarrow 1) = \frac{2e^2 a^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2 \omega^4 \tau^2};$$

$$б) W(0 \rightarrow 1) = \frac{e^2 a^2 \mathcal{E}_0^2}{2\hbar^2 \omega^4 \tau^2}.$$

8.51. Условие $d\mathcal{E}_0 l^2 \ll \tau \hbar^3$ обеспечивает применимость адиабатического приближения, так что, согласно 8.49, в.ф. ротатора в момент времени t является в.ф. основного состояния ротатора в поле $\mathcal{E}(t)$. В частности, при $t \rightarrow \infty$ эта в.ф. имеет вид (см. 8.19)

$$\tilde{\Psi}_0(\varphi) \approx (\sqrt{\pi} \varphi_0)^{-1/2} \exp(-\varphi^2/2\varphi_0^2), \quad \varphi_0 = (\hbar^2/Id\mathcal{E}_0)^{1/4} \ll 1.$$

Вероятности различных значений проекции момента определяются, согласно общим принципам, выражениями

$$\begin{aligned} \tilde{C}_m &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-im\varphi} \tilde{\Psi}_0(\varphi) d\varphi \approx (2\pi \sqrt{\pi} \varphi_0)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-im\varphi - \frac{\varphi^2}{2\varphi_0^2}} d\varphi = \\ &= \sqrt{\frac{\varphi_0}{\sqrt{\pi}}} e^{-m^2 \varphi_0^2/2}, \end{aligned}$$

$$\omega(m) = |\tilde{C}_m|^2 = \frac{\varphi_0}{\sqrt{\pi}} e^{-m^2 \varphi_0^2}$$

(мы заменили интервал интегрирования $(-\pi, \pi)$ по φ на $(-\infty, +\infty)$, так как в.ф. $\tilde{\Psi}_0(\varphi)$ при $|\varphi| \gg 1$ пренебрежимо мала).

8.52. У рассматриваемой системы, очевидно, сохраняется четность. Поэтому удобно анализировать временную зависимость четной и нечетной составляющих в.ф. отдельно. Обозначив $\Psi_0(x)$ в.ф. основного состояния частицы в случае одной ямы $U(x) = -\alpha\delta(x)$ (см. 2.11) и считая для определенности, что при $t \rightarrow -\infty$ частица была связана правой ямой, запишем в.ф.

*) Легко сообразить, что в данной задаче причиной совпадения результата адиабатического рассмотрения (условия применимости которого $\tau \gg \frac{1}{\omega}, \frac{e\mathcal{E}_0 a}{\hbar\omega^2 \tau} \ll 1$) с результатом теории возмущений (условие применимости $\frac{e\mathcal{E}_0 a}{\hbar\omega} \ll 1$) является специфическое действие однородного поля на осциллятор, сводящееся фактически лишь к сдвигу «точки подвеса».

начального состояния в виде

$$\Psi(t = -\infty) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi^{(+)} + \Psi^{(-)} \},$$

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \Psi_0 \left(x - \frac{L(-\infty)}{2} \right) \pm \Psi_0 \left(x + \frac{L(-\infty)}{2} \right) \right\}. \quad (1)$$

При бесконечном расстоянии между ямами $L(-\infty) = \infty$ как четная, так и нечетная составляющие в.ф. (1) описывают частицу, находящуюся в связанных состояниях в поле двух ям с одинаковой энергией, равной энергии основного состояния в поле одной ямы (уровень двукратно вырожден).

Каким бы ни был закон «сближения» ям, можно утверждать, что, когда ямы сливаются в одну, нечетная составляющая в.ф. описывает несвязанную частицу, так как в поле одной δ -функциональной ямы имеется только одно, четное состояние д.с. Временная же зависимость четной в.ф. и вероятность частице остаться в связанном состоянии существенно зависят от характера сближения ям. Но если процесс сближения ям носит адиабатический характер (см. 8.49), то результат очевиден: частица будет оставаться в основном состоянии. Так как в начальном состоянии вероятность четного состояния частицы равна $1/2$, то в условиях задачи вероятность частице остаться в связанном состоянии при медленном сближении ям также равна $1/2$. Условие применимости полученного результата: $|\dot{L}| \ll \alpha/\hbar$. Фактически это условие должно выполняться, лишь когда ямы сближаются на достаточно малое расстояние $L \sim \hbar^2/m\alpha$ ($\hbar^2/m\alpha$ — характерное расстояние, на котором локализована в.ф. частицы в δ -функциональной яме). На больших расстояниях такого жесткого ограничения на скорость движения ям нет, так как в этом случае частица, локализованная вблизи одной из ям, не «чувствует» наличия другой, а при движении ямы с произвольной (но постоянной) скоростью в соответствии с принципом относительности никаких переходов не происходит. Фактически при $L \gg \hbar^2/m\alpha$ требуется лишь, чтобы не было слишком большим ускорение \dot{L} (читателю предлагается самостоятельно получить соответствующее ограничение).

В заключение еще раз подчеркнем, что при решении задачи мы использовали адиабатическое приближение только при рассмотрении четной части в.ф. Что же касается нечетной части в.ф., то при рассмотрении ее временной зависимости адиабатическое приближение заведомо неприменимо, когда ямы сближаются до расстояния L_0 , при котором нечетный уровень дискретного спектра исчезает (сливается с непрерывным спектром: $L_0 = \hbar^2/m\alpha$).

8.53. Обозначим через $\Psi_n(x, \xi)$, $E_n(\xi)$ с.ф. и с.з. оператора $\hat{H} = \hat{H}_1(x) + V(x, \xi)$ при фиксированных значениях ξ координат

«медленной» подсистемы, т. е.

$$[\hat{H}_1 + V(x, \xi)] \Psi_{n_1}(x, \xi) = E_{n_1}(\xi) \Psi_{n_1}(x, \xi). \quad (1)$$

В адиабатическом приближении точные с. ф. полного гамильтониана системы \hat{H} представляются приближенно в виде

$$\Psi(x, \xi) \approx \Psi_{n_1 n_2}(x, \xi) = \Phi_{n_1 n_2}(\xi) \Psi_{n_1}(x, \xi),$$

где в. ф. $\Phi_{n_1 n_2}$ и приближенные значения $E_{n_1 n_2}$ энергетических уровней системы определяются из у. Ш.

$$(\hat{H}_1 + V(x, \xi) + \hat{H}_2) \Phi_{n_1 n_2}(\xi) \Psi_{n_1}(x, \xi) \approx E_{n_1 n_2} \Phi_{n_1 n_2}(\xi) \Psi_{n_1}(x, \xi), \quad (2)$$

если в этом уравнении проделать следующие преобразования: учитывая соотношение (1), умножить обе части уравнения (2) слева на $\Psi_{n_1}^*(x, \xi)$, проинтегрировать по координатам x «быстрой» подсистемы и пренебречь действием оператора $\hat{H}_2(\xi)$ на переменную ξ , входящую в в. ф. $\Psi_{n_1}(x, \xi)$ (т. е. считать $\hat{H}_2 \Phi \approx \Phi \hat{H}_2$). В результате для определения в. ф. $\Phi_{n_1 n_2}$ и энергетических уровней $E_{n_1 n_2}$ получается у. Ш.

$$(\hat{H}_2(\xi) + E_{n_1}(\xi)) \Phi_{n_1 n_2}(\xi) = E_{n_1 n_2} \Phi_{n_1 n_2}(\xi),$$

в которое входят только координаты «медленной» подсистемы, а взаимодействие ее с «быстрой» подсистемой эффективно характеризуется «потенциальной» энергией, равной $E_{n_1}(\xi)$.

8.54. Задача решается в адиабатическом приближении, расчетные формулы которого приведены в предыдущей задаче. В роли «быстрой» подсистемы выступает движение частицы вдоль оси x , в роли «медленной» — движение вдоль оси y (такое рассмотрение возможно в силу условия $a \ll b$). Используя обозначения предыдущей задачи (с единственной заменой ξ на y) и выбрав $H_1 = \hat{p}_x^2/2m$, $H_2 = \hat{p}_y^2/2m$, $V(x, y) = U(x, y)$, легко находим

$$\Psi_{n_1}(x, y) = \sqrt{\frac{2}{a(y)}} \sin \frac{\pi(n_1+1)(x+a(y)/2)}{a(y)}, \quad E_{n_1}(y) = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1+1)^2}{2ma^2(y)}$$

(движение частицы вдоль оси x при фиксированном y — движение частицы в бесконечно глубокой яме шириной $a(y) = 2a \sqrt{1 - y^2/b^2}$).

Движение частицы вдоль оси y , согласно уравнению (2) предыдущей задачи, определяется «потенциалом»

$$V(y) = \begin{cases} E_{n_1}(y) = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1+1)^2}{8ma^2(1-y^2/b^2)}, & |y| < b, \\ \infty, & |y| > b. \end{cases}$$

У. Ш. с такой потенциальной энергией точно решено быть не может. Однако можно заметить, что в случае не очень сильно возбужденных состояний в таком поле в. ф. стационарных состояний локализованы на расстоянии $|y| \ll b$, а в этой области

потенциал можно разложить в ряд

$$V(y) \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{8ma^2 b^2} y^2.$$

При этом задача вычисления $\Phi_{n_1 n_2}(y)$ и $E_{n_1 n_2}$ сводится к задаче о гармоническом осцилляторе.

Окончательные выражения для нижних уровней энергии рассматриваемой системы и приближенных с. ф. имеют вид

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2 \pi (n_1 + 1)}{2mab} (n_2 + 1/2), \quad n_{1,2} = 0, 1, \dots,$$

$$\Psi_{n_1 n_2}(x, y) = (2^{n_2} \sqrt{\pi} y_0 n_2!)^{-1/2} \exp\left(-\frac{y^2}{2y_0^2}\right) H_{n_2}(y/y_0) \Psi_{n_1}(x, y)$$

$$\left(y_0 = \sqrt{\frac{2ab}{\pi(n_1 + 1)}}, \quad y_0^2 (n_2 + 1/2) \ll b^2\right).$$

8.55. Задача решается аналогично предыдущей. В роли быстрой подсистемы выступает движение частицы вдоль оси z , в роли медленной — движение в плоскости x, y . В. ф. и уровни энергии быстрой подсистемы при фиксированных координатах x, y медленной имеют вид

$$\Psi_{n_1}(z; x, y) = \sqrt{\frac{2}{b(\rho)}} \sin \frac{\pi(n_1 + 1)(z + b(\rho)/2)}{b(\rho)}, \quad E_{n_1}(\rho) = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{2mb^2(\rho)},$$

где $b(\rho) = 2b \sqrt{1 - (x^2 + y^2)/a^2} = 2b \sqrt{1 - \rho^2/a^2}$.

Движение медленной подсистемы (после усреднения по движению быстрой) характеризуется эффективной потенциальной энергией

$$U(\rho) = \begin{cases} E_{n_1}(\rho), & \rho < a, \\ \infty, & \rho > a. \end{cases}$$

Разлагая $U(\rho)$ в ряд вблизи точки минимума ($\rho = 0$):

$$U(\rho) \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{8mb^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{8ma^2 b^2} \rho^2, \quad (1)$$

замечаем, что задача вычисления в. ф. медленной подсистемы и энергетических уровней системы сводится к задаче о плоском осцилляторе (см. 4.5). Уровни энергии частицы в адиабатическом приближении представляются в виде

$$E_{n_1 N} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1 + 1)^2}{8mb^2} + \frac{\hbar^2 \pi (n_1 + 1)}{2mab} (N + 1) \quad (n_1, N = 0, 1, \dots),$$

$$(N + 1) \ll (n_1 + 1) a/b$$

(N — главное квантовое число соответствующего плоского осциллятора; ограничение на значение N вытекает из условия локализации в. ф. медленной подсистемы на расстояниях $\rho \ll a$, при которых справедливо разложение (1)).

8.56. Быстрой подсистемой является движение частицы в плоскости x, y , медленной — движение вдоль оси z . В. ф. быстрой

подсистемы и соответствующие им уровни энергии при фиксированном значении координаты z (см. задачу 4.8 о частице в бесконечно глубокой двумерной яме; $a(z) = a \sqrt{1 - z^2/b^2}$) имеют вид

$$\Psi_{n,m}(\rho, \varphi) = C e^{im\varphi} J_m \left(\frac{\alpha_{n+1, m}}{a(z)} \right), \quad E_{n,m} = \frac{\hbar^2 \alpha_{n+1, m}^2}{2\mu a^2(z)}.$$

Разлагая эффективную потенциальную энергию медленной подсистемы в ряд вблизи точки минимума (точно так же, как это было сделано при решении двух предыдущих задач), приходим к выражению

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\hbar^2 \alpha_{n_1+1, m}^2}{2\mu a^2} + \frac{\hbar^2 \alpha_{n_1+1, m}}{\mu a b} (n_2 + 1/2), \quad n_{1,2} = 0, 1, \dots,$$

для нижних энергетических уровней частицы в адиабатическом приближении.

8.57. Быстрая подсистема — осциллятор, характеризующийся координатой x . При фиксированном значении y — координаты медленной подсистемы — в. ф. и уровни энергии быстрой подсистемы имеют вид ($\omega = \sqrt{k/m}$)

$$\Psi_{n_1}(x, y) \equiv \Psi_{n_1}^{\text{осц}}(x + \alpha y/k), \quad E_{n_1}(y) = \hbar\omega (n_1 + 1/2) - \alpha^2 y^2 / 2k.$$

В. ф. и уровни энергии медленной подсистемы определяются согласно уравнению (2) задачи 8.53

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dy^2} + \hbar\omega (n_1 + 1/2) + \frac{k - \alpha^2/k}{2} y^2 \right) \Phi_{n_1, n_2}(y) = E_{n_1, n_2} \Phi_{n_1, n_2}(y),$$

и, очевидно,

$$E_{n_1, n_2} = \hbar\omega (n_1 + 1/2) + \hbar\omega \sqrt{\frac{m}{M} \left(1 - \frac{\alpha^2}{k^2} \right)} (n_2 + 1/2). \quad (1)$$

Для получения точного решения задачи сделаем замену переменной $z = y \sqrt{M/m}$. При этом гамильтониан системы принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{kx^2}{2} + \frac{km}{2M} z^2 + \alpha \sqrt{\frac{m}{M}} xz.$$

Далее, перейдем к новым переменным \tilde{x}, \tilde{z} согласно формулам

$$x = \tilde{x} \cos \varphi_0 + \tilde{z} \sin \varphi_0, \quad z = \tilde{z} \cos \varphi_0 - \tilde{x} \sin \varphi_0, \quad (2)$$

$$\text{tg } 2\varphi_0 = -2\alpha \sqrt{m/M} / k(1 - m/M).$$

При этом преобразовании, представляющем поворот в плоскости \tilde{x}, \tilde{z} (так что $\Delta = \tilde{\Delta}$), гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \tilde{\Delta} + \frac{k_1}{2} \tilde{x}^2 + \frac{k_2}{2} \tilde{z}^2,$$

$$k_{1,2} = \frac{k(1 + m/M)}{2} \pm \frac{k}{2} \sqrt{\left(1 - \frac{m}{M} \right)^2 + \frac{4m\alpha^2}{Mk^2}}$$

(т. е. координаты \tilde{x} , \tilde{z} — нормальные) и его с. з. — энергетические уровни системы, — очевидно, равны

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{1 + \frac{m}{M} + \sqrt{\left(1 - \frac{m}{M}\right)^2 + \frac{4m\alpha^2}{Mk^2}}} (n_1 + 1/2) + \sqrt{1 + \frac{m}{M} - \sqrt{\left(1 - \frac{m}{M}\right)^2 + \frac{4m\alpha^2}{Mk^2}}} (n_2 + 1/2) \right] \quad (3)$$

(отметим, что наиболее простой способ определения собственных частот состоит не в явном выполнении преобразования (2), а в вычислении главных значений тензора k_{in} , входящего в потенциальную энергию осцилляторов $U = 1/2 k_{in} x_i x_n$; главные значения тензора k_{in} легко находятся из условий инвариантности следа и детерминанта матрицы k_{in} при вращениях системы координат).

Из выражения (3) легко увидеть, как получается результат (1) адиабатического рассмотрения.

8.58. При решении задачи используем адиабатическое приближение (см. 8.53). В роли быстрой подсистемы выступает легкая частица (ее координата x_1), медленной подсистемы — тяжелая частица. Уровни энергии и в.ф. быстрой подсистемы при фиксированной координате x_2 медленной имеют вид (считаем для определенности, что тяжелая частица находится слева от легкой; в.ф. равна нулю при $x_1 > a$ и $x_1 < x_2$)

$$\Psi_{n_1}(x_1, x_2) = \sqrt{\frac{2}{a-x_2}} \sin \frac{\pi(n_1+1)(x_1-x_2)}{a-x_2}, \quad E_{n_1}(x_2) = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1+1)^2}{2m(a-x_2)^2}.$$

Энергия $E_{n_1}(x_2)$ выступает в роли эффективной потенциальной энергии для медленной подсистемы при $0 < x_2 < a$; при $x_2 < 0$ и $x_2 > a$ потенциальная энергия равна бесконечности. Для нахождения энергетических уровней системы, соответствующих не слишком сильно возбужденным состояниям медленной подсистемы, разложим эффективную потенциальную энергию при $x_2 > 0$ в ряд вблизи точки минимума $x_2 = 0$:

$$U(x_2) \approx \begin{cases} \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1+1)^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1+1)^2}{ma^3} x_2, & x_2 > 0, \\ \infty, & x_2 < 0 \end{cases}$$

(ср. с решением задачи 8.54). При этом из уравнения (2) задачи 8.53, определяющего в.ф. $\Phi_{n_1 n_2}$ медленной подсистемы и энергетические уровни системы, легко находим уровни энергии системы в адиабатическом приближении (с учетом результата задачи 2.15):

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1+1)^2}{2ma^2} + \left(\frac{\hbar^6 \pi^4 (n_1+1)^4}{2m^2 M a^6} \right)^{1/3} \alpha_{n_2+1}, \quad n_{1,2} = 0, 1, \dots \quad (1)$$

Читателю предлагается самостоятельно убедиться в том, что условием применимости результата (1) является выполнение неравенства

$$\alpha_{n+1} \ll \pi(n+1)^{2/3} (M/m)^{1/3}$$

(напомним, что α_n с ростом n возрастает; см. 2.15).

Г л а в а 9

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

9.1. Искомые уровни E_n определяются правилом квантования Бора — Зоммерфельда

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = \pi(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1)$$

где $p(x) = \sqrt{2m(E_n - U(x))}$; a, b — точки поворота, определяемые условием $p(a) = p(b) = 0$. В случае осциллятора ($U = kx^2/2$, $b = -a = \sqrt{2E_n/k}$) левая часть в соотношении (1) оказывается равной ($t = x \sqrt{k/2E_n}$, $\omega = \sqrt{k/m}$)

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx = \frac{2E_n}{\hbar\omega} \int_{-1}^1 \sqrt{1-t^2} dt = \frac{\pi E_n}{\hbar\omega},$$

так что

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad (2)$$

что совпадает с точным значением, хотя по способу получения применимость результата (2) ограничена формально условием $n \gg 1$.

9.2. В. ф. справа от правой точки остановки b имеет обычный квазиклассический вид:

$$\Psi(x) = \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p(x)| dx\right), \quad x > b. \quad (1)$$

Этой в. ф. в области $x < b$ соответствует в. ф. вида

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right), \quad x < b. \quad (2)$$

Напомним, что значение фазы $\pi/4$ в выражении (2) для в. ф. получается при помощи сшивания квазиклассических решений (1), (2) у. Ш. в окрестности точки $x = b$ (где эти решения неприменимы) с помощью точного решения у. Ш. в этой области в предположении справедливости линейной аппроксимации потенциала.

Для рассматриваемого потенциала квазиклассическое решение (2) справедливо, вообще говоря, вплоть до значений x , непосредственно примыкающих к левой точке поворота $x=0$, и граничное условие $\Psi(0)=0$ определяет искомое правило квантования

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^b p(x) dx + \frac{\pi}{4} = \pi(n+1), \quad n=0, 1, 2, \dots,$$

или

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m[E_n - U(x)]} dx = \pi(n + 3/4) \quad (3)$$

(отметим, что условие квантования (3) можно также легко получить из правила Бора — Зоммерфельда, примененного к симметричному потенциалу $U(x) = U(|x|)$, если воспользоваться результатом задачи 2.12).

9.3. Используя формулу (3) предыдущей задачи с $U(x) = mgx$, легко находим

$$E_n = \left(\frac{9\pi^2}{8}\right)^{1/3} (mg^2\hbar^2)^{1/3} (n + 3/4)^{2/3}. \quad (1)$$

Выражение (1), полученное в квазиклассическом приближении, применимо при $n \gg 1$. Однако обычно квазиклассические выражения для энергетических уровней и при $n \sim 1$ не сильно отличаются от точных значений. Так, в рассматриваемой задаче формула (1) при $n=0$ дает $E_0 = 1,84(mg^2\hbar^2)^{1/3}$, а точное значение энергии основного состояния частицы равно $1,86(mg^2\hbar^2)^{1/3}$.

9.4. Используя правило квантования в квазиклассическом случае

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2m[E_n - U_0(|x|/a)^v]} dx = \pi(n + 1/2),$$

после простых преобразований находим

$$E_n = \left(\frac{\pi\hbar(n+1/2)}{2\sqrt{2m}C_\nu a}\right)^{2\nu/(\nu+2)} U_0^{2/(\nu+2)}, \quad (1)$$

где $C_\nu = \int_0^1 \sqrt{1-t^\nu} dt$.

Используя выражение (1), получаем ($n \gg 1$)

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n \approx \frac{\partial E_n}{\partial n} \approx E_n 2\nu/n(\nu+2),$$

и так как $E_n \propto n^{2\nu/(\nu+2)}$, то при $2\nu/(\nu+2) > 1$, т. е. $\nu > 2$, расстояние между соседними уровнями с ростом n увеличивается; при $\nu < 2$ это расстояние уменьшается; при $\nu = 2$ (т. е. в случае осциллятора) уровни эквидистантны.

Плотность состояний дискретного спектра равна

$$g(E) = \frac{1}{\Delta E_n} = \frac{n(v+2)}{2vE_n} \propto E^{(2-v)/2v}.$$

9.5. В квазиклассическом правиле квантования уровней

$$\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{a(E)}^{b(E)} \sqrt{E - U(x)} dx \approx n\pi$$

рассматриваем формально n как функцию переменной E . Эта функция $n(E)$ представляет число состояний д.с. с энергией, меньшей E , и дифференцирование ее по энергии E дает искомую плотность состояний д.с.:

$$g(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar} \int_{a(E)}^{b(E)} \frac{dx}{\sqrt{E - U(x)}} = \frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b \frac{dx}{v(x)} = \frac{1}{\hbar\omega(E)}, \quad (1)$$

где $\omega(E)$ имеет простой смысл: $T = 2\pi/\omega$ представляет период движения в рассматриваемом поле классической частицы с энергией E . Так как плотность состояний д.с. равна $g(E) = 1/\Delta E$, где ΔE — расстояние между соседними уровнями, то согласно (1) $\Delta E = \hbar\omega(E)$.

9.6. Условие применимости квазиклассического рассмотрения при $x \rightarrow x_0$

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \approx \hbar \left| \frac{d}{dx} \sqrt{\frac{|x - x_0|^v}{2m\alpha}} \right| = \frac{\hbar v}{2\sqrt{2m\alpha}} |x - x_0|^{(v-2)/2} \ll 1 \quad (1)$$

выполнено в случае $v > 2$ и нарушается при $v < 2$. При $v = 2$ решение у.Ш. в окрестности точки x_0 имеет квазиклассический вид лишь при выполнении неравенства $\sqrt{m\alpha} \gg \hbar$.

9.7. У.Ш. при $E = 0$ для s -состояний ($l = 0$) имеет вид ($\Psi = \chi(r)/r$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{\alpha}{r^v} \chi = 0.$$

Решения этого уравнения имеют квазиклассический вид при выполнении условия

$$\hbar \left| \frac{d}{dr} \frac{1}{p(r)} \right| = \frac{\hbar v}{2\sqrt{2m\alpha}} r^{(v-2)/2} \ll 1. \quad (1)$$

Для $v > 2$ условие (1) выполнено при $r \ll (\sqrt{m\alpha}/v\hbar)^{2/(v-2)}$, т. е. квазиклассика применима лишь на малых расстояниях; при $v < 2$, наоборот, квазиклассика применима на больших расстояниях $r \gg (\sqrt{m\alpha}/v\hbar)^{-2/(2-v)}$. В случае $v = 2$ при выполнении условия $\sqrt{m\alpha} \gg \hbar$ решение у.Ш. имеет квазиклассический вид во всем пространстве; при $\sqrt{m\alpha} \leq \hbar$ квазиклассика вообще неприменима.

9.8. При решении задачи квазиклассика может быть использована только при выполнении условия $\sqrt{m\alpha} \gg \hbar$ (сравнить с 9.7). Если указанное условие выполнено, то в. ф. имеет квазиклассический вид при всех значениях $x \geq a$ (при $x < a$ $\Psi \equiv 0$), за исключением узкой области вблизи правой точки остановки $x = b = \sqrt{\alpha/|E|}$. Энергетические уровни определяются правилом квантования, установленным в 9.2, т. е.

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m \left[-|E_n| + \frac{\alpha}{x^2} \right]} dx = \pi(n + 3/4) \quad (E_n = -|E_n| < 0). \quad (1)$$

С помощью замены переменной $z = \sqrt{1 - |E_n| x^2 / \alpha}$ интеграл в этом выражении легко вычисляется, и оно принимает вид

$$\sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}} \left(-z_0 + \frac{1}{2} \ln \frac{1+z_0}{1-z_0} \right) = \pi(n + 3/4), \quad (2)$$

где

$$z_0 = \sqrt{1 - a^2 |E_n| / \alpha}. \quad (3)$$

Из соотношений (2) и (3) явное выражение для E_n можно получить только в случаях $|E_n| \ll \alpha/a^2$ и $|E_n| \approx \alpha/a^2$. В первом случае (верхние уровни) из (2) и (3) получаем в результате разложения по малому параметру $|E_n| a^2 / \alpha$

$$\sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}} \left(-1 + \ln 2 + \frac{1}{2} \ln \frac{\alpha}{a^2 |E_n|} + O\left(\frac{a^2 |E_n|}{\alpha}\right) \right) = \pi(n + 3/4),$$

откуда

$$E_n \approx -\frac{4\alpha}{a^2} \exp \left\{ -\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m\alpha}} (n + 3/4) - 2 \right\}. \quad (4)$$

Из выражения (4) следует, что расстояние между верхними уровнями энергии (число которых бесконечно велико) уменьшается экспоненциально с ростом n , так что плотность состояний д. с. (сравнить с 9.5) при $|E| \rightarrow 0$ растет как $|E|^{-1}$.

Явный вид в. ф. $\Psi_n(x)$ легко получить, если воспользоваться общими выражениями для в. ф. справа и слева от правой точки поворота, установленными в 9.2, и при вычислении интеграла $\int p(x) dx$ сделать указанную выше замену переменной.

9.9. Найдем в квазиклассическом приближении вид функции $\chi(r)$, связанной с в. ф. $\Psi_{n,lm}$ соотношением $\chi = r\Psi_{n,00}$. Эта функция удовлетворяет одномерному у. Ш. с потенциалом $U = -\alpha/r$ и граничному условию $\chi(0) = 0$. Точками поворота являются $r = a = 0$ и $r = b = \alpha/|E|$. Квазиклассическое решение

справа от правой точки поворота имеет вид

$$\chi_{\text{кв}} = \frac{C}{2\sqrt{|p(r)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^r |p(r)| dr\right), \quad r > b$$

$$\left(p = \sqrt{2m\left(-|E| + \frac{\alpha}{r}\right)}\right).$$

Такому решению соответствует при $r < b$ в. ф.

$$\chi_{\text{кв}} = \frac{C}{\sqrt{p(r)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_r^b p(r) dr + \frac{\pi}{4}\right), \quad r < b, \quad (1)$$

причем для справедливости этого выражения требуется выполнение условия применимости квазиклассики; но в кулоновском поле на малых расстояниях ($r \rightarrow 0$) это условие не выполняется (см., например, 9.6 и 9.7). Поэтому, чтобы воспользоваться граничным условием $\chi(0) = 0$, определяющим фактически энергетический спектр, квазиклассическое решение (1) следует на малых расстояниях шить с точным решением у. Ш. (если же просто потребовать $\chi_{\text{кв}}(0) = 0$, то получаемый результат для уровней энергии будет менее точным).

На малых расстояниях $r \ll \alpha/|E|$ у. Ш. принимает вид

$$d^2\chi/dr^2 + (\tilde{\alpha}/r)\chi = 0, \quad \tilde{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2.$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее условию $\chi(0) = 0$, выражается через функцию Бесселя (см., например, [12]):

$$\chi(r) = A \sqrt{r} J_1(2\sqrt{\tilde{\alpha}r}),$$

и при $\sqrt{\tilde{\alpha}r} \gg 1$ имеет асимптотическое поведение

$$\chi(r) \approx A \sqrt{\frac{r}{\pi^2 \tilde{\alpha}}} \sin\left(2\sqrt{\tilde{\alpha}r} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (2)$$

Квазиклассическое решение у. Ш. при $r < b$, очевидно, можно представить также (наряду с (1)) в виде

$$\chi_{\text{кв}} = \frac{\tilde{C}}{\sqrt{p(r)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^r p(r) dr + \gamma\right). \quad (3)$$

При значениях r в интервале, определяемом условиями

$$r \ll \alpha/|E|, \quad 1/\sqrt{\tilde{\alpha}} \ll \sqrt{r}, \quad (4)$$

имеем $|d\chi/dr| \sim (\tilde{\alpha}r)^{-1/2} \ll 1$, т. е. применима квазиклассика, и в. ф. (3) с учетом соотношения $p(r) \approx \sqrt{2m\alpha/r} = \hbar \sqrt{\tilde{\alpha}/r}$,

справедливого в интервале (4), принимает вид

$$\chi_{\text{кв}}(r) = \dot{C} \sqrt[4]{\frac{r}{\bar{a}\hbar^2}} \sin(2\sqrt{\bar{a}r} + \gamma). \quad (5)$$

В то же время в интервале (4) точное решение у.Ш. имеет вид (2), и сравнение выражений (2) и (5) для в.ф. позволяет найти значение параметра $\gamma = -\pi/4$. Условие же совпадения квазиклассических выражений (1) и (3) для в.ф. приводит к соотношению

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^r p dr + \gamma + \frac{1}{\hbar} \int_r^b p dr + \frac{\pi}{4} \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m \left(\frac{\alpha}{r} - |E_{n_r}| \right)} dr = \pi(n_r + 1), \quad (6)$$

представляющему искомое условие квантования энергетических уровней s -состояний частицы в кулоновском поле в квазиклассическом приближении ($n_r = 0, 1, \dots$ — радиальное квантовое число).

Из соотношения (6) легко находим

$$E_{n_r} = -m\alpha^2/2\hbar^2(n_r + 1)^2, \quad (7)$$

что совпадает с точным значением при произвольном n_r , хотя формальное условие применимости выражения (7) определяется существованием интервала (4) переменной r , использованного для сшивания точного и квазиклассического решений, и требует, как обычно, $n_r \gg 1$.

9.10. Задача решается аналогично предыдущей. Квазиклассическое решение у.Ш. в области финитного движения классической частицы имеет вид (сравнить с выражением (3) предыдущей задачи)

$$\chi_{\text{кв}} = \frac{C}{\sqrt{p(r)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^r p(r) dr + \gamma\right), \quad (1)$$

$$p(r) = \sqrt{2m \left(-|E| + \frac{\alpha}{r^\nu} \right)}.$$

У.Ш. на малых расстояниях $r^\nu \ll \alpha/|E|$ принимает вид

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\bar{\alpha}}{r^\nu} \chi = 0, \quad \bar{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2.$$

Его решение, удовлетворяющее граничному условию $\chi(0) = 0$,

$$\chi(r) = A \sqrt{r} J_{\frac{1}{2-\nu}} \left(\frac{2}{2-\nu} \sqrt{\bar{\alpha}r^{2-\nu}} \right)$$

имеет при $\sqrt{\bar{\alpha}r^{2-\nu}} \gg 1$ асимптотическое поведение

$$\chi(r) \approx A \sqrt{\frac{2-\nu}{\pi \sqrt{\bar{\alpha}}}} r^{\nu/4} \sin\left(\frac{2}{2-\nu} \sqrt{\bar{\alpha}r^{2-\nu}} - \frac{\pi}{2(2-\nu)} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (2)$$

Интервал значений переменной r

$$r^\nu \ll \alpha/|E|, \quad 1 \ll \sqrt{\tilde{\alpha}r^{2-\nu}} \quad (3)$$

является областью «перекрывания» (т. е. областью, в которой применимы и точные и квазиклассические выражения для в. ф.), и сравнение в. ф. (1) в этой области

$$\chi_{\text{кв}} \approx C (r^\nu/\tilde{\alpha}\hbar^2)^{1/4} \sin\left(\frac{2}{2-\nu} \sqrt{\tilde{\alpha}r^{2-\nu}} + \gamma\right)$$

с точной в. ф. (2) позволяет найти значение $\gamma = \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2(2-\nu)}$ и тем самым получить условие квантования уровней энергии (сравнить с выводом формулы (6) предыдущей задачи):

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m\left(-|E_{n_r}| + \frac{\alpha}{r^\nu}\right)} dr = \pi\left(n_r + \frac{1}{2} + \frac{1}{2(2-\nu)}\right). \quad (4)$$

Из соотношения (4) следует

$$E_{n_r} = - \left\{ \frac{\sqrt{2m} C_\nu \alpha^{1/\nu}}{\pi\hbar [n_r + 1/2 + 1/2(2-\nu)]} \right\}^{2-\nu}, \quad (5)$$

где

$$C_\nu = \int_0^1 \sqrt{x^{-\nu} - 1} dx.$$

Условие применимости полученного выражения (5): $n_r \gg 1$.

9.11. Задача решается аналогично 9.9. Основная проблема — сшивание точного и квазиклассического решений на малых расстояниях. Исходим из уравнения для функции χ (связанной с в. ф. Ψ следующим образом: $\Psi_{n_r, l m} = Y_{l m} \chi_{n_r, l}/r$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \chi - \frac{\alpha}{r} \chi = E\chi.$$

В этом уравнении при малых r можно опустить слагаемое $E\chi$, и оно принимает вид

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\tilde{\alpha}}{r} \chi - \frac{l(l+1)}{r^2} \chi = 0, \quad \tilde{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2.$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее условию $\chi(0) = 0$ (см., например, [12]),

$$\chi(r) = A \sqrt{r} J_{2l+1}(2\sqrt{\tilde{\alpha}r})$$

при $\sqrt{\tilde{\alpha}r} \gg 2l+1$ имеет асимптотическое поведение

$$\chi(r) \approx A \sqrt{\frac{r}{\pi^2 \tilde{\alpha}}} \sin\left(2\sqrt{\tilde{\alpha}r} - \pi l - \frac{\pi}{4}\right). \quad (1)$$

В интервале переменной r , определяемом условиями

$$r \ll a/|E|, \quad (2l+1) \ll \sqrt{\bar{\alpha}r}, \quad (2)$$

применимы как точное решение (1), так и квазиклассическое представление в. ф.

$$\chi_{\text{кв}} = \frac{C}{\sqrt{p(r)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^r p(r) dr + \gamma\right), \quad (3)$$

где a — левая точка остановки, причем в выражении для $p(r)$ можно опустить слагаемое, содержащее E . Простое вычисление интеграла

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_a^r p dr \approx \frac{1}{\hbar} \int_a^r \sqrt{2m\left(\frac{\alpha}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)} dr \approx 2\sqrt{\bar{\alpha}r} - \\ - \pi\sqrt{l(l+1)} \end{aligned} \quad (4)$$

позволяет, согласно выражениям (1), (3), (4), найти значение параметра $\gamma = -\pi l - \frac{\pi}{4} + \pi\sqrt{l(l+1)}$ и получить условие квантования уровней с моментом l в квазиклассическом приближении (сравнить с 9.9):

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m\left[-|E_{n_r, l}| + \frac{\alpha}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]} dr = \pi(n_r+1) - \gamma - \frac{\pi}{4}. \quad (5)$$

Учитывая значение интеграла

$$\int_a^b \frac{1}{r} \sqrt{(b-r)(r-a)} dr = \frac{\pi}{2} (a+b - 2\sqrt{ab}),$$

из выражения (5) после простых преобразований находим

$$E_{n_r, l} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(n_r+l+1)^2}, \quad (6)$$

что совпадает с точным значением при произвольных n_r и l , хотя по квазиклассическому способу получения формулы (6) она формально применима лишь для $n_r \gg 1$.

В связи с полученным в данной задаче правилом квантования (5) необходимо сделать следующее замечание. Это правило отличается от стандартной формулы Бора — Зоммерфельда (согласно последней правую часть (5) следовало бы заменить на $\pi(n_r + 1/2)$, и получающийся результат был бы менее точным). Причина этого в том, что во всей области малых r ($0 < r \leq a$) в эффективной потенциальной энергии важную роль (доминирующую при $r \rightarrow 0$) играет центробежный потенциал $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$, а, как было установлено в 9.6, для такого по-

тенциала квазиклассическое рассмотрение применимо лишь при $\sqrt{l(l+1)} \gg 1$. Соответственно в случае $l \sim 1$ квазиклассика неприменима, и именно поэтому пришлось искать точное решение у. Ш. в области малых r .

Однако в случае $l \gg 1$ уже применимо стандартное квазиклассическое рассмотрение и с самого начала можно было бы воспользоваться правилом квантования Бора — Зоммерфельда. Действительно, в этом случае в выражении для γ можно положить $\sqrt{l(l+1)} \approx l + 1/2$, так что (5) принимает вид формулы Бора — Зоммерфельда.

9.12. С известной точностью (см. ниже) для решения задачи можно воспользоваться правилом квантования Бора — Зоммерфельда

$$\frac{\sqrt{2m}}{h} \int_{\tilde{a}}^{\tilde{b}} \sqrt{E_n - U(x)} dx = \pi (n + 1/2), \quad (1)$$

положив в нем $n = N - 1$ (N — порядковый номер уровня; напомним, что первому, основному уровню отвечает $n = 0$) и устремляя E_{N-1} к нулю. Учитывая явный вид $U(x)$, легко находим искомые значения параметров потенциала:

$$\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = \left(N - \frac{1}{2}\right)^2. \quad (2)$$

По поводу точности формулы (2) следует заметить, что учет в ней в правой части слагаемого $(-1/2)$ является превышением точности (так же как учет слагаемого $1/2$ в правой части формулы (1) при расчете «верхних» энергетических уровней $E_n \rightarrow 0$). Это связано с тем, что при выводе формулы (1) предполагается, как известно, что потенциал удовлетворяет условию квазиклассичности при всех x , за исключением узких областей вблизи точек остановок (поворота). В задачах же, подобных данной, точки поворота при $E_n \rightarrow 0$ «уходят» на бесконечность ($\tilde{a} \rightarrow -\infty$, $\tilde{b} \rightarrow +\infty$), а условие применимости квазиклассики выполнено лишь для конечных значений x . В данной задаче условие применимости квазиклассики $|d\lambda/dx| \ll 1$ для $E = 0$ принимает вид

$$|x/a| \ll \sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} \equiv \xi. \quad (3)$$

Изменения в условиях сшивания квазиклассического и точного решений по сравнению с теми, которые были использованы при выводе (1), проявляются обычно результативно в замене множителя $(n + 1/2)$ в правой части (1) на $(n + \gamma)$, где γ зависит от конкретного вида потенциала и обычно $\gamma \sim 1$ (иллюстрацией этого обстоятельства являются результаты задач 9.2, 9.9, 9.10, 9.11).

Имея в виду сказанное выше, уточним результат (2) (так как квазиклассическое рассмотрение предполагает $n \gg 1$, то

такое уточнение может показаться лишним; однако это не так, потому что при корректном вычислении значения γ квазиклассический результат и при $n \sim 1$ имеет высокую точность). Вспомним, что условию появления нового (по счету) состояния д. с. частицы при углублении потенциальной ямы отвечает существование не возрастающего при $x \rightarrow \pm\infty$ решения у. Ш. для $E = 0$ (см. 2.18). Для нахождения решения у. Ш. поступим следующим образом: при больших $|x|$ получим точное решение, при конечных $|x|$ — квазиклассическое и «сошьем» решения.

На больших расстояниях $|x| \gg a$ у. Ш. принимает вид

$$\Psi'' + \frac{\alpha}{x^4} \Psi = 0, \quad \alpha = 2mU_0 a^4 / \hbar^2 = \xi^2 a^2,$$

и его решение, не возрастающее при $x \rightarrow \pm\infty$ (см., например, [12]),

$$\Psi = A_{\pm} \sqrt{|x|} J_{1/2}(\sqrt{\alpha}|x|),$$

или

$$\Psi = A_{\pm} x \sqrt{\frac{2}{\pi \sqrt{\alpha}}} \sin \frac{\sqrt{\alpha}}{x} = A_{\pm} x \sqrt{\frac{2}{\pi \sqrt{\alpha}}} \sin \frac{\xi a}{x}. \quad (4)$$

При $\xi \gg 1$ (именно этот случай и представляет интерес с точки зрения применения квазиклассики) в интервале $a \ll x \ll \ll a\xi$ применимы как точное решение (4), так и квазиклассическое, которое представим в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{кв}} &= \frac{C}{\sqrt{\rho(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{\infty} p dx + \gamma_1 \right) = \\ &= \frac{C}{\sqrt{\rho(x)}} \sin \left(\frac{\pi \xi}{2} - \xi \operatorname{arctg} \frac{x}{a} + \gamma_1 \right) \approx \\ &\approx Cx (2mU_0 a^4)^{-1/4} \sin (\xi a/x + \gamma_1). \end{aligned} \quad (5)$$

Сравнение (4) и (5) дает $\gamma_1 = 0$.

Квазиклассическое решение можно записать также в виде

$$\Psi_{\text{кв}} = \frac{C'}{\sqrt{\rho(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^x p(x) dx + \gamma_2 \right), \quad (6)$$

в котором его удобно сшивать с точным решением в интервале $a \ll -x \ll a\xi$; очевидно, $\gamma_2 = 0$.

Условием совпадения решений (5) и (6), представляющих одну и ту же функцию, является, очевидно, равенство

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = \pi N, \quad \text{или} \quad \xi = N, \quad (7)$$

которое и представляет искомое уточненное условие появления нового, N -го, уровня д. с. при углублении ямы.

Из выражения (7) следует

$$\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = N^2. \quad (8)$$

Следует указать, что рассматриваемая задача допускает точное решение, согласно которому

$$\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = N^2 - 1. \quad (9)$$

Сравнение (2), (8), (9) показывает, что, действительно, уточненное условие (8) лучше согласуется с точным, чем «упрощенное» (2). Так, для $N=10$ различие правых частей в (8) и (9) составляет 1%, а различие между (2) и (9) — 10%. Отметим также, что даже для $N=2$, когда квазиклассика формально неприменима, различие между (8) и (9) составляет лишь 25% (что же касается случая $N=1$, то напомним, что, согласно 2.13, в рассматриваемом поле при любых значениях параметров всегда имеется хотя бы одно состояние д. с.).

9.13. Задача решается аналогично предыдущей. Условие появления нового, N -го, уровня д. с. (основной уровень — первый) имеет вид

$$\frac{\sqrt{2mU_0a^4}}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x^4 + a^4}} = \pi N,$$

т. е. $U_0a^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 N^2}{C^2}$, где $C = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{1+z^4}} = 3,72$.

9.14. Задача решается аналогично 9.12. На больших расстояниях квазиклассика неприменима. Поэтому квазиклассическое решение ($E=0$)

$$\Psi_{\text{кв}} = \frac{C}{\sqrt{-2mU(x)}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^{\infty} \sqrt{-2mU(x)} dx + \gamma_1 \right\} \quad (1)$$

следует сшить на большом расстоянии с точным решением, не возрастающим при $x \rightarrow \pm\infty$. У.Ш. на больших расстояниях ($U(x) \approx -\alpha x^{-\nu}$)

$$\Psi'' + (\tilde{\alpha}/x^\nu) \Psi = 0 \quad (\tilde{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2)$$

имеет не возрастающее при $x \rightarrow +\infty$ решение (см., например, [12])

$$\Psi = A \sqrt{x} J_{\frac{1}{\nu-2}} \left(\frac{2\sqrt{\tilde{\alpha}}}{\nu-2} x^{(\nu-2)/2} \right). \quad (2)$$

При

$$x^{(\nu-2)/2} \ll \sqrt{\tilde{\alpha}}/(\nu-2) \quad (3)$$

Функция (2) имеет вид

$$\Psi \approx Ax^{v/4} \sqrt{\frac{v-2}{\pi \sqrt{a}}} \sin \left(\frac{2\sqrt{a}}{v-2} x^{(2-v)/2} - \frac{\pi}{2(v-2)} + \frac{\pi}{4} \right), \quad (4)$$

и если на расстоянии, удовлетворяющем неравенству (3), потенциал уже имеет асимптотическое поведение $U(x) \approx -\alpha x^{-v}$, то в этой области переменной x , наряду с точным решением (4), справедливо и квазиклассическое (1), имеющее при этом вид

$$\Psi_{\text{кв}} = \frac{C}{\sqrt{2ma}} x^{v/4} \sin \left(\frac{\sqrt{2ma}}{\hbar} \frac{2}{v-2} x^{(2-v)/2} + \gamma_1 \right). \quad (5)$$

Сравнение (4) и (5) дает

$$\gamma_1 = -\pi/2(v-2) + \pi/4.$$

Представив квазиклассическое решение в виде

$$\Psi_{\text{кв}} = \frac{\tilde{C}}{\sqrt{-2mU(x)}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^x \sqrt{-2mU(x)} dx + \gamma_2 \right\},$$

при аналогичных предположениях находим $\gamma_2 = \gamma_1$ и получаем искомое выражение (сравнить с решением задачи 9.12):

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{-2mU(x)} dx = \pi N + \frac{\pi}{v-2} - \frac{\pi}{2}, \quad (6)$$

определяющее значения параметров потенциала $U(x)$, отвечающие условию появления нового, N -го по счету, состояния д. с. при углублении потенциальной ямы.

9.15. Разложим потенциал вблизи правой точки поворота x_0 в ряд по степеням $(x - x_0)$, ограничиваясь линейным членом:

$$U(x) \approx U(x_0) + vU(x_0) \frac{(x - x_0)}{x_0}, \quad U(x_0) = E. \quad (1)$$

Область применимости этого разложения очевидна: $|x - x_0| \ll \ll x_0$. Для того чтобы можно было использовать стандартные формулы сшивания квазиклассических решений справа и слева от точки поворота и правило Бора — Зоммерфельда, необходимо, чтобы на границе области $|x - x_0| \ll x_0$, где еще справедливо разложение (1), уже было выполнено условие применимости квазиклассики $|d\lambda/dx| \ll 1$. Положив $(x - x_0) \equiv yx_0$, $|y| \ll 1$, легко находим

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \sim \frac{\hbar}{\sqrt{mU_0 a^2}} |y|^{-3/2} (x_0/a)^{-1-v/2}. \quad (2)$$

Так как для сильно возбужденных уровней $E_n \rightarrow \infty$ и соответственно $x_0 \rightarrow \infty$, то из выражения (2) следует, что в рассмат-

риваемом случае $v > 0$ стандартные условия шивания квазиклассических в. ф. выполнены.

9.16. Обозначим через $E_n^{(0)}$ и $E_n = E_n^{(0)} + \delta E_n$ энергетические уровни в квазиклассическом приближении в полях $U_0(x)$ и $U(x) = U_0(x) + \delta U(x)$ соответственно. Они определяются правилом квантования Бора — Зоммерфельда. В частности,

$$\int_{a+\delta a}^{b+\delta b} \sqrt{2m[E_n^{(0)} + \delta E_n - U_0(x) - \delta U(x)]} dx = \pi\hbar(n + 1/2). \quad (1)$$

Разлагая подынтегральную функцию в этом выражении с учетом малости δE_n и $\delta U(x)$, находим искомое смещение уровня *):

$$\delta E_n \approx \frac{1}{\tau} \int_a^b \frac{\delta U(x)}{v(x)} dx, \quad v(x) = \sqrt{\frac{2}{m} [E_n^{(0)} - U_0(x)]}, \quad (2)$$

$$\tau = \int_a^b \frac{dx}{v(x)}.$$

Полученный результат находится в согласии с известной формулой первого порядка теории возмущений $\delta E_n \approx E_n^{(1)} = = V_{nn} \equiv (\delta U)_{nn}$, если в ней при вычислении матричного элемента воспользоваться квазиклассическим видом в. ф. При этом следует иметь в виду, что доминирующий вклад в матричный элемент $(\delta U)_{nn}$, как и в нормировочный интеграл $\int |\Psi_n^{(0)}(x)|^2 dx = 1$, вносит область между точками поворота **) (область финитного движения классической частицы), и поэтому можно ограничиться следующим приближенным представлением нормированной на единицу в. ф.:

$$\Psi_n^{(0)}(x) \approx \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\tau v(x)}} \sin \left[\frac{m}{\hbar} \int_a^x v(x) dx + \frac{\pi}{4} \right], & a < x < b, \\ 0, & x < a, \quad x > b, \end{cases}$$

(из-за быстрой осцилляции функции $\sin [\dots]$ величину $\sin^2 [\dots]$ в подынтегральных выражениях для нормировочного интеграла

*) Изменение левой части (1) за счет изменения положений точек поворота равно нулю.

**) Если же $\delta U(x)$ отлично от нуля лишь вне области классического движения частицы с соответствующей энергией $E_n^{(0)}$, то согласно (2) $\delta E_n = 0$. Конечно, сдвиг уровня есть и в этом случае, однако его расчет требует специального рассмотрения.

и матричного элемента $(\delta U)_{nn}$ можно заменить ее средним значением, равным $1/2$).

9.17. Рассмотрим частицу в поле $U(x) = \alpha|x|^\nu$ (при $\nu > 0$ также $\alpha > 0$, при $\nu < 0$, наоборот, $\alpha < 0$; в противном случае в таком поле вообще отсутствуют состояния д. с.). Для доказательства теоремы вириала (см. 7.6) непосредственно в рамках квазиклассического приближения найдем U_{nn} и T_{nn} и сравним их.

При вычислении среднего значения U_{nn} в n -м состоянии в квазиклассическом случае ($n \gg 1$) следует учесть, что доминирующий вклад в матричный элемент U_{nn} , как и в нормировочный интеграл, вносит область значений x между точками поворота, и поэтому можно ограничиться приближенным видом в. ф. $\Psi_n(x)$, приведенным в предыдущей задаче, а в получающемся интеграле быстро осциллирующий множитель $\sin^2[\dots]$ следует заменить его средним значением, равным $1/2$ (сравнить с 9.16). Таким образом,

$$U_{nn} = \frac{1}{\tau} \int_a^b U(x) \frac{dx}{v(x)} = \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2} \tau} \int_a^b \frac{U(x) dx}{\sqrt{E_n - U(x)}} \quad (1)$$

(τ и $v(x)$ приведены в 9.16).

Учитывая симметричность потенциала (так что $a = -b$ и $\int_{-b}^b \dots = 2 \int_0^b \dots$) и его конкретный вид, проделаем в (1) следующее преобразование:

$$\begin{aligned} \int_0^b \frac{\alpha x^\nu dx}{\sqrt{E_n - \alpha x^\nu}} &= - \int \frac{2x}{\nu} d \sqrt{E_n - \alpha x^\nu} = - \frac{2x}{\nu} \sqrt{E_n - \alpha x^\nu} \Big|_{x=0}^{x=b} + \\ &+ \frac{2}{\nu} \int_0^b \sqrt{E_n - \alpha x^\nu} dx = \frac{2}{\nu \sqrt{2m}} \int_0^b p(x) dx \quad (2) \end{aligned}$$

(внеинтегральное слагаемое равно нулю, так как $x = b$ — точка остановки, а при подстановке нижнего предела $x = 0$ учтено, что $\nu > -2$, ибо в противном случае возникало бы «падение» частиц на центр поля $x = 0$; более того, специального рассмотрения требует уже случай поля притяжения с $\nu \leq -1$, так что рассматриваемый потенциал является «хорошим» лишь для $\nu > -1$).

Имея в виду (2) и правило квантования Бора — Зоммерфельда, получаем

$$U_{nn} = \frac{\pi \hbar}{\nu \tau} (n + 1/2), \quad (3)$$

Аналогично, используя тождество $T_{nn} = (E_n - U(x))_{nn}$, легко находим

$$T_{nn} = \frac{\sqrt{m}}{\tau \sqrt{2}} \int_{-b}^b \frac{E_n - U(x)}{\sqrt{E_n - U(x)}} dx = \frac{1}{2\tau} \int_{-b}^b p(x) dx = \frac{\pi \hbar}{2\tau} (n + 1/2). \quad (4)$$

Сравнение (3) и (4) дает $2T_{nn} = vU_{nn}$, что и составляет содержание теоремы вириала.

В заключение отметим, что для рассматриваемого потенциала правило Бора — Зоммерфельда позволяет легко получить энергетический спектр частицы (см. 9.4).

9.18. Так как $n \gg 1$, то, вообще говоря, применимо квазиклассическое приближение и среднее значение кинетической энергии частицы может быть представлено в виде (см. формулу (4) предыдущей задачи)

$$\bar{T} \equiv T_{nn} = \frac{\pi \hbar}{2\tau} (n + \gamma), \quad \tau = m \int_a^b \frac{dx}{p(x)} = m \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2m(E_n - U(x))}} \quad (1)$$

(мы написали $(n + \gamma)$ в правиле квантования вместо более привычного значения $(n + 1/2)$ по правилу Бора — Зоммерфельда, имея в виду общий случай, когда стандартные условия сшивания квазиклассических решений вблизи точек поворота могут и не выполняться; см., например, 9.2, 9.9 и др.).

Замечая, что

$$\tau = \frac{\partial}{\partial E_n} \int_a^b \sqrt{2m(E_n - U(x))} dx = \pi \hbar \frac{\partial n}{\partial E_n},$$

согласно (1) находим искомое среднее:

$$\bar{T} = T_{nn} = \frac{1}{2} (n + \gamma) \frac{dE_n}{dn}.$$

9.19. Доминирующий вклад в матричный элемент вносит область между точками поворота, и можно воспользоваться приближенным видом нормированных в.ф., приведенным в 9.16. При этом, ввиду предполагаемой близости состояний m и n , значения точек поворота и величин τ для этих состояний можно считать одинаковыми. С учетом сказанного матричный элемент F_{mn} легко преобразовать к виду

$$F_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{F} \Psi_n dx \approx \frac{1}{\tau} \int_a^b \frac{F(x)}{v(x)} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x (p_m - p_n) dx' \right] dx - \\ - \frac{1}{\tau} \int_a^b \frac{F(x)}{v(x)} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x (p_m + p_n) dx' + \frac{\pi}{2} \right] dx, \quad (1)$$

Подынтегральная функция во втором слагаемом в (1) быстро осциллирует, так что его значение много меньше первого слагаемого, и им можно пренебречь. Используя известный результат, что в квазиклассике разность энергий соседних уровней равна $\hbar\omega$ (см., например, 9.5), причем $\omega = \pi/\tau$, представим E_m в виде $E_m \approx E_n + \hbar\omega(m-n)$. Разлагая в ряд

$$p_m = \sqrt{2m[E_n + \hbar\omega(m-n) - U(x)]} \approx p_n + \frac{\hbar\omega(m-n)}{v(x)}$$

и учитывая сказанное выше, выражение (1) можно записать в виде

$$F_{mn} = \frac{1}{\tau} \int_a^b \frac{F(x)}{v(x)} \cos \left[\omega(m-n) \int_a^x \frac{dx'}{v(x')} \right] dx. \quad (2)$$

Сделаем замену переменной $x = x(t)$ и, соответственно, $t = t(x)$, где $x(t)$ представляет зависимость от времени координаты классической частицы с энергией, равной $E_m \approx E_n$, причем считаем для определенности $x(0) = a$. При этом $x(T/2) = b$, где $T = 2\tau$ — период финитного движения классической частицы. Выражение (2) принимает вид

$$F_{mn} = \frac{2}{T} \int_0^{T/2} F(x(t)) \cos[\omega(m-n)t] dt,$$

или

$$F_{mn} = \frac{1}{T} \int_0^T F(x(t)) e^{-i\omega(m-n)t} dt$$

(изменению t от 0 до T соответствует изменение x от a до b , и обратно), т. е. имеет место равенство $F_{mn} = F_{s=m-n}$.

Для осциллятора $x = A \cos \omega t$ и, очевидно, отличны от нуля только фурье-компоненты $\tilde{x}_1 = \tilde{x}_{-1} = A/2$. Так как энергия классического осциллятора равна $E_{\text{класс}} = kA^2/2$, то отличные от нуля матричные элементы координаты осциллятора в квазиклассическом приближении равны $(x)_{n+1, n} = (x)_{n, n+1} = \sqrt{\frac{\hbar\omega(n+1)^*}{2k}}$ (сравнить с 8.3).

9.20. Задача решается аналогично предыдущей. Следует учесть, что при действии оператора \hat{p} на квазиклассическую функцию нужно дифференцировать по переменной x лишь в аргументе синуса. Простое вычисление дает

$$(p^k)_{mn} = \frac{2}{T} \int_0^{T/2} dt p^k(t) \cdot \begin{cases} \cos[\omega(m-n)t], & k \text{ — четное,} \\ -i \sin[\omega(m-n)t], & k \text{ — нечетное.} \end{cases} \quad (1)$$

*) При этом мы положили $E_{\text{класс}} = (E_n + E_m)/2$ и учли, что $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

Так как знаки импульса при временах $0 < t < T/2$ и $T/2 < t < T$ противоположны, то оба выражения (1) можно объединить в одно:

$$(p^k)_{mn} = \frac{1}{T} \int_0^T p^k(t) e^{-i\omega(m-n)t} dt,$$

и соответственно

$$(F)_{mn} = \left(\sum_k C_k p^k \right)_{mn} = \frac{1}{T} \int_0^T F(p(t)) e^{-i\omega(m-n)t} dt.$$

9.21. В силу симметричности потенциала $U(x)$ стационарные состояния частицы имеют определенную четность, так что квазиклассические в. ф. в области барьера между ямами имеют вид

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \left\{ \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p| dx\right) \pm \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p| dx\right) \right\}.$$

Эти функции можно переписать в виде

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{C}{\sqrt{|p|}} \left\{ R \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x |p| dx\right) \pm R^{-1} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x |p| dx\right) \right\}, \quad (1)$$

где $R = \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^0 \sqrt{2m(E^{(\pm)} - U(x))} dx\right\}$ ($-b$ — правая точка остановки при движении классической частицы в первой яме; строго говоря, индексы « \pm », относящиеся к четным и нечетным решениям, следовало бы указывать и у $p(x)$ и у точек остановки, но мы этого не делаем, чтобы не загромождать формул).

В. ф. (1) в классической области между точками остановки $-a$ и $-b$ соответствуют квазиклассические в. ф. вида

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{кв}}^{(\pm)} &= \frac{\tilde{C}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx + \frac{\pi}{4} + \gamma_{\pm}\right) \equiv \\ &\equiv \frac{\tilde{C}}{\sqrt{p}} \left\{ \cos \gamma_{\pm} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx + \frac{\pi}{4}\right) + \right. \\ &\quad \left. + \sin \gamma_{\pm} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx + \frac{\pi}{4}\right) \right\}. \quad (2) \end{aligned}$$

Это — наиболее общий вид квазиклассического решения, причем константы \tilde{C} , γ_{\pm} и $E^{(\pm)}$ ($E^{(\pm)}$ входит в выражение для $p(x)$) определяются из условия сшивания этого решения с решением

(1) в области барьера между ямами и с убывающим решением при $x \rightarrow -\infty$ в классически недоступной области слева от левой точки остановки (при этом условия сшивания решений в правой яме будут выполнены автоматически в силу определенной четности в. ф.). Последнее из указанных условий сшивания решений приводит, как известно, к квазиклассическому решению вида

$$\Psi_{\text{кв}} = \frac{\tilde{C}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p dx + \frac{\pi}{4}\right), \quad (3)$$

а из тождественности решений (2) и (3) следует условие квантования

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p dx + \frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx + \frac{\pi}{4} + \gamma_{\pm} = \pi(n+1),$$

или

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{-b} p(x) dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right) - \gamma_{\pm}. \quad (4)$$

Для определения γ_{\pm} требуется сшить решения (1) и (2). Чтобы это сделать, рассмотрим два частных решения в области ямы ($-a < x < -b$) вида

$$\psi^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx + \frac{\pi}{4}\right), \quad \psi^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx + \frac{\pi}{4}\right). \quad (5)$$

Первому из них, как известно, в области барьера ($x > -b$) соответствует убывающее квазиклассическое решение

$$\psi^{(1)} = \frac{1}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x |p| dx\right). \quad (6)$$

Возрастающее решение в области барьера соответствует частному решению $\psi^{(2)}$:

$$\psi^{(2)} = \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x |p| dx\right), \quad x > -b \quad (7)$$

(более детальное обсуждение вопроса о виде в. ф. $\psi^{(2)}$ в области барьера подготовленному читателю предлагается провести самостоятельно).

Учитывая, что $\psi^{(1, 2)}$ являются решениями одного и того же уравнения — у. Ш.

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

легко найти, что для них

$$W = \psi^{(1)'}\psi^{(2)} - \psi^{(1)}\psi^{(2)'} = \text{const.} \quad (8)$$

Вычислив (8) для $x < -b$ (т. е. с использованием функций (5)), находим $W = -1/\hbar$; для $x > -b$ (с учетом (6) и (7)) $W = -C_2/\hbar$, так что

$$C_2 = 1 \quad (9)$$

(при вычислении W следует дифференцировать по переменной x лишь в аргументах синуса, косинуса и экспоненты, как более быстро меняющихся, по сравнению с $|p|^{-1/2}$, множителей в квазиклассических функциях).

Так как в.ф. (1) и (2) описывают одно и то же решение у.Ш. (в различных областях x), то они представляют одну и ту же линейную комбинацию в.ф. $\psi^{(1,2)}$, и, учитывая полученные выше формулы «сшивания» (5)–(7), (9), легко находим соотношения

$$\tilde{C} \cos \gamma_{\pm} = \pm 2CR^{-1}, \quad \tilde{C} \sin \gamma_{\pm} = CR,$$

откуда

$$\text{tg } \gamma_{\pm} = \pm 1/2 R^2. \quad (10)$$

В случае полностью непроницаемого барьера $R = 0$ согласно (10) $\gamma_{\pm} = 0$ и из (4) следует $E_n^{(+)} = E_n^{(-)} = E_n^{(0)}$, т. е. энергии четного и нечетного уровней одинаковы и равны энергии $E_n^{(0)}$ в поле одной ямы. Для барьера конечной проницаемости $R \ll 1$ сдвиги четного и нечетного уровней $\Delta E_n^{(\pm)} = E_n^{(\pm)} - E_n^{(0)}$ легко получаются из соотношений (4) и (10), если в левой части (4) произвести разложение в ряд подынтегральной функции с учетом малости $\Delta E_n^{(\pm)}$:

$$\begin{aligned} \int p dx &= \int \sqrt{2m[E_n^{(0)} - U(x) + \Delta E_n^{(\pm)}]} dx \approx \\ &\approx \int \sqrt{2m[E_n^{(0)} - U]} dx + \int \frac{\Delta E_n^{(\pm)} dx}{\sqrt{\frac{2}{m}[E_n^{(0)} - U]}} = \\ &= \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{T \Delta E_n^{(\pm)}}{2}, \end{aligned}$$

где

$$T = 2 \int_{-a}^{-b} \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}[E_n^{(0)} - U(x)]}}$$

— период финитного движения в яме классической частицы с энергией $E_n^{(0)}$, а в выражении $\gamma_{\pm} \approx \text{tg } \gamma_{\pm}$ ограничиться несмещен-

ным значением $E_n^{(0)}$ энергетического уровня. Таким образом, находим

$$\Delta E_n^{(\pm)} = \mp \frac{\hbar}{T} R^2 = \mp \frac{\hbar \omega_0}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^b |p(x)| dx\right) \quad (11)$$

($\omega_0 = 2\pi/T$); как и следовало ожидать, четный уровень лежит ниже соответствующего нечетного. Искомое расщепление уровня равно $\delta E_n = E_n^{(-)} - E_n^{(+)}$. Отметим, что экспоненциальный множитель в (11) можно связать с коэффициентом прозрачности барьера, разделяющего ямы, для частиц с энергией $E_n^{(0)}$ (см. задачи § 2 данной главы).

9.22. Шаровые функции являются с. ф. операторов l_z и \hat{I}^2 и могут быть представлены в виде *)

$$\tilde{Y}_{Lm} = f_{Lm}(\theta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (1)$$

(в (1) мы учли не представляющее проблемы решение задачи на с. ф. и с. з. оператора l_z). При этом уравнение $\hat{I}^2 \tilde{Y}_{Lm} = L^2 \tilde{Y}_{Lm}$ принимает вид

$$\frac{d^2 f}{d\theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{df}{d\theta} + \left[L^2 - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] f = 0. \quad (2)$$

Перейдя к новой функции $\chi = \sqrt{\sin \theta} f$, получаем из (2)

$$\chi'' + \left[L^2 + \frac{1}{4} - \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2 \theta} \right] \chi = 0, \quad (3)$$

что по форме совпадает с одномерным у. Ш. для частицы с массой $\mu = 1/2$ и $\hbar = 1$, при этом $L^2 + 1/4$ выступает в роли энергии E , а $U(\theta) = (m^2 - 1/4)/\sin^2 \theta$ — в роли потенциальной энергии; координата частицы $0 \leq \theta \leq \pi$, и в точках $\theta = 0, \pi$ в. ф. χ удовлетворяет граничным условиям $\chi(0) = \chi(\pi) = 0$.

Легко заметить, что при $m^2 \gg 1$ (и L^2 , не слишком близком к m^2) для решения (3) можно воспользоваться квазиклассическим приближением (условие $m^2 \gg 1$ является необходимым, в противном случае, при $m^2 \sim 1$, квазиклассика заведомо неприменима при $\theta \ll 1$ и $(\pi - \theta) \ll 1$; сравнить с 9.6), что позволяет для определения L^2 воспользоваться правилом Бора — Зоммерфельда, принимающим в данном случае вид

$$\int_a^b \sqrt{L^2 + \frac{1}{4} - \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2 \theta}} d\theta = \pi(n + 1/2), \quad n = 0, 1, \dots; \quad (4)$$

a, b — точки поворота, в которых подкоренное выражение обращается в нуль. Так как $L^2 \gg 1$ и $m^2 \gg 1$, то легко сообра-

*) Сначала получим в квазиклассическом приближении решение задачи на с. ф. и с. з., а затем свяжем \tilde{Y}_{Lm} с асимптотикой стандартно определенных шаровых функций Y_{lm} .

зять, что обе «1/4» в подкоренном выражении в (4) можно опустить (их учет в левой части (4) дал бы вклад в интеграл порядка 1/L, так как $\sqrt{L^2 + 1/4} \approx L + 1/8L$ и т. д., что находится за пределами квазиклассической точности; сравнить со значением правой части), и, воспользовавшись значением интеграла

$$\int \sqrt{L^2 - \frac{m^2}{\sin^2 \theta}} d\theta = L \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{(L^2 - m^2) \operatorname{tg}^2 \theta - m^2}}{L} - m \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{(L^2 - m^2) \operatorname{tg}^2 \theta - m^2}}{m} \quad (5)$$

(интеграл легко взять, сделав замену $z = \operatorname{tg}^2 \theta$), получить

$$(L - |m|) = (n + 1/2) \quad (6)$$

(отметим, что точки поворота, для которых $\sin^2 \theta = m^2/L^2$, расположены симметрично относительно точки $\theta = \pi/2$).

Полученный результат (6) можно переписать в виде

$$L^2 = (n + |m| + 1/2)^2 = (l + 1/2)^2; \quad l = 0, 1, \dots; \quad l \geq |m|. \quad (7)$$

Хотя проведенное рассмотрение предполагает $L \gg 1$ (и тем самым $l \gg 1$), мы в выражении (7) указываем и значения $l = 0, 1, \dots$, т. е. $l \sim 1$, чтобы подчеркнуть смысл целого числа l как нумерующего с.з. L^2 в порядке их возрастания*). Поэтому квазиклассическое значение $L^2 = (l + 1/2)^2$ следует сравнить непосредственно с точным $l(l + 1)$.

Используя общие формулы квазиклассического приближения, можно также найти явный вид функции χ , а с нею и

$$f_{Lm} = \frac{C}{(L^2 \sin^2 \theta - m^2)^{1/4}} \sin \left\{ \int_{\theta}^b \sqrt{L^2 - \frac{m^2}{\sin^2 \theta}} d\theta + \frac{\pi}{4} \right\} \quad (8)$$

(значение интеграла в (8) указано выше, приведенное выражение для f_{Lm} относится к наиболее существенной области — между точками поворота).

Имея в виду, что значение нормировочного интеграла для квазиклассических в.ф. определяется в основном областью между точками поворота, легко найти величину C в (8) из условия нормировки ($\int |\tilde{Y}_{Lm}|^2 d\Omega = 1$):

$$\begin{aligned} \int_0^\pi |f_{Lm}|^2 \sin \theta d\theta &\approx |C|^2 \int_a^b (L^2 \sin^2 \theta - m^2)^{-1/2} \sin^2 \{ \dots \} \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{|C|^2}{2} \int \frac{dz}{\sqrt{L^2 - m^2 - L^2 z^2}} = \frac{\pi |C|^2}{2L} = 1, \quad (9) \end{aligned}$$

*) Такой смысл l можно обосновать сравнением числа нулей функции f_{Lm} , равного $l - |m|$ для точного решения и n — для полученного квазиклассического.

т. е.

$$|C|^2 = 2L/\pi = (2l + 1)/\pi$$

(в (9) мы заменили быстро осциллирующий множитель $\sin^2 \{ \dots \}$ его средним значением, равным $1/2$, и сделали замену переменной $z = \cos \theta$).

Читателю предлагается самостоятельно найти фазовый множитель у $C = e^{i\alpha} |C| = e^{i\alpha} ((2l + 1)/\pi)^{1/2}$, чтобы можно было отождествить полученные выражения с асимптотикой стандартным образом определенных шаровых функций, а также рассмотреть предельные случаи $l - |m| \ll |m|$ и $l \gg m^2$, для которых возможно дальнейшее упрощение полученных выражений.

9.23. Начальная стадия решения задачи дублирует решение предыдущей задачи (вплоть до формулы (3) включительно). Однако теперь при решении уравнения (3), очевидно, нельзя воспользоваться квазиклассическим рассмотрением ($n \sim 1$).

Для решения указанного уравнения в рассматриваемом случае ($m^2 \gg 1$, $L - |m| \sim 1$) замечаем, что «потенциальная энергия» $U(\theta)$ имеет глубокий минимум при $\theta = \pi/2$ и в ф. нижних «уровней» локализованы вблизи этой точки. Соответственно, разлагая $U(\theta)$ в ряд

$$U(\theta) = \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2 \theta} \approx \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \approx m^2 \left[1 + \left(\theta - \frac{\pi}{2} \right)^2 \right]$$

и сделав замену переменной $x = \theta - \pi/2$, преобразуем рассматриваемое уравнение к виду

$$\frac{d^2 \chi}{dx^2} + [L^2 - m^2 - m^2 x^2] \chi = 0,$$

представляющему у. Ш. для осциллятора. Учитывая известный вид с. ф. и с. з. гамильтониана осциллятора, находим

$$\begin{aligned} \chi_n = C (|m|/\pi)^{1/4} (2^n n!)^{-1/2} \exp \left[-\frac{|m|(\theta - \pi/2)^2}{2} \right] \times \\ \times H_n \left(\sqrt{|m|} \left(\theta - \frac{\pi}{2} \right) \right), \end{aligned} \quad (1)$$

$$L^2 - m^2 = 2|m|(n + 1/2), \quad \text{или} \quad L^2 \approx (|m| + n + 1/2)^2$$

$$(n^2 \ll |m|), \quad n = 0, 1, \dots$$

Полученное правило квантования момента согласуется, естественно, с результатом предыдущей задачи.

Для отождествления функции ($L = l + 1/2 = |m| + n + 1/2$)

$$\tilde{Y}_{Lm} = \frac{\chi_n}{\sqrt{\sin \theta}} \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

с асимптотикой шаровой функции Y_{lm} фазовый множитель C в (1) следует выбрать равным

$$C = i^l (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}.$$

В заключение отметим, что при $1 \ll n^2 \ll |m|$ справедливы рассмотрения как данной задачи, так и предыдущей. Читателю предлагается самостоятельно убедиться в совпадении соответствующих результатов (см. в связи с этим также и 9.24).

9.24. Начальная стадия решения задачи дублирует решение 9.22 (вплоть до формулы (3) включительно). Однако теперь (при $m^2 \sim 1$) даже для $L \gg 1$ квазиклассика неприменима при $\theta L \ll 1$ и $(\pi - \theta)L \ll 1$. Для решения задачи поступим следующим образом: найдем приближенное решение вне указанных интервалов, а затем «сошьем» его с точным решением в области значений θ , близких к $\theta = 0$ и $\theta = \pi$.

В уравнении

$$\chi'' + \left[L^2 + \frac{1}{4} - \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2 \theta} \right] \chi = 0 \quad (1)$$

при $L \gg 1$ и $m^2 \sim 1$ во всем интервале изменения переменной θ , за исключением узких областей $\theta L \lesssim 1$ и $(\pi - \theta)L \lesssim 1$, можно пренебречь слагаемым $[1/4 - (m^2 - 1/4)/\sin^2 \theta] \chi$ и получить решение в виде

$$\chi = \sqrt{\sin \theta} f \approx A \sin(L\theta + \gamma). \quad (2)$$

Значения L и γ определяются из условия сшивания (2) с точным решением уравнения (1) в окрестности точек $\theta = 0$ и $\theta = \pi$, удовлетворяющим требуемым граничным условиям ($\chi(0) = \chi(\pi) = 0$).

При $\theta \ll 1$ уравнение (1) для функции $f = \chi/\sqrt{\sin \theta}$ принимает вид (см. 9.22)

$$f'' + \frac{1}{\theta} f' + \left[L^2 - \frac{m^2}{\theta^2} \right] f = 0,$$

и его решение, не возрастающее при $\theta \rightarrow 0$,

$$f = \frac{\chi}{\sqrt{\sin \theta}} = C J_m(L\theta) \quad (3)$$

при $L\theta \gg 1$ имеет асимптотическое поведение

$$f \approx C \sqrt{\frac{2}{\pi L \theta}} \sin \left(L\theta - \frac{\pi |m|}{2} + \frac{\pi}{4} \right). \quad (4)$$

В интервале $1/L \ll \theta \ll 1$ справедливы оба представления решения: (2) и (4), так что

$$A = C \sqrt{\frac{2}{\pi L}}, \quad \gamma = \frac{\pi}{4} - \frac{\pi |m|}{2}. \quad (5)$$

Вместо сшивания решения (2) с точным в окрестности точки $\theta = \pi$ проще поступить следующим образом: учесть симметрию уравнения (1) по отношению к преобразованию переменной $\theta \rightarrow \theta' = \pi - \theta$, приводящую к соотношению

$$\chi(\pi - \theta) = \pm \chi(\theta). \quad (6)$$

Согласно (2), (5), (6) получаем правило квантования момента

$$L^2 = (l + 1/2)^2, \quad l = 0, 1, \dots, \quad l \geq |m| \quad (7)$$

(знаки «+» и «-» в (6) относятся соответственно к четным и нечетным значениям величины $(l - |m|)$).

Проведенное рассмотрение предполагает $L \gg 1$ (и тем самым $l \gg 1$). Однако, как и в предыдущих задачах, мы указываем в (7) и значения $l = 0, 1, \dots$, т. е. $l \sim 1$, чтобы подчеркнуть смысл целого числа l как нумерующего с. з. L^2 в порядке их возрастания.

Для определения A (или C) из условия нормировки

$$\int_0^\pi |f|^2 \sin \theta \, d\theta = \int_0^\pi |\chi|^2 \, d\theta = 1 \quad (8)$$

замечаем, что доминирующий вклад в интеграл (8) дает область переменной θ , в которой справедливо представление (2), и легко получаем

$$|A|^2 = 2/\pi, \quad |C|^2 = L = (2l + 1)/2. \quad (9)$$

Для отождествления полученных выражений со стандартным образом определенными шаровыми функциями следует выбрать

$$C = i^l (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2}}.$$

9.25. Как известно, точное решение у. Ш. для осциллятора

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_n + \frac{x^2}{2} \Psi_n = E_n \Psi_n \quad (1)$$

(используем систему единиц $\hbar = m = k = 1$, k — упругость осциллятора; при этом $\omega = 1$) дает $E_n = (n + 1/2)$ и нормированные в. ф.

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} e^{-x^2/2} H_n(x). \quad (2)$$

Решение уравнения (1) в квазиклассическом приближении в области финитного движения классической частицы ($U = x^2/2 < E_n$) имеет вид

$$\Psi_{n, \text{кв}} = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\int_0^x p(x) \, dx + \alpha \right), \quad (3)$$

где

$$p(x) = \sqrt{2 \left(E_n - \frac{x^2}{2} \right)} = \sqrt{2n + 1 - x^2}$$

(мы учли, что квазиклассический результат для E_n совпадает с точным, см. 9.1).

Так как с. ф. имеют определенную четность, равную $(-1)^n$, то величину α в (3) выберем равной $\alpha = -\pi n/2$.

Для нормировки в. ф. значение C в (3) следует взять равным $C = \sqrt{2/\pi}$ (при нормировке в. ф. следует учесть, что доминирующий вклад в нормировочный интеграл $\int |\Psi_n|^2 dx = 1$ вносит область финитного движения классической частицы, причем ввиду быстрой осцилляции множителя $\cos^2(\dots)$ его можно заменить средним значением, равным $1/2$; сравнить с 9.16).

Учитывая сказанное, запишем (3) в виде

$$\Psi_{n, \text{кв}} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi} \sqrt{2n+1-x^2}} \cos\left(\int_0^x \sqrt{2n+1-x^2} dx - \frac{\pi n}{2}\right). \quad (4)$$

Сравнение (2) и (4) дает

$$H_n(x) \approx \tilde{C} \frac{\sqrt{2^{n+1}n!}}{[\pi(2n+1-x^2)]^{1/4}} e^{x^2/2} \cos\left(\int_0^x \sqrt{2n+1-x^2} dx - \frac{\pi n}{2}\right), \quad (5)$$

где $\tilde{C} = \pm 1$ еще подлежит определению.

Выражение (5), справедливое при $n \gg 1$ (и при $|x| < \sqrt{2n+1}$), причем x не должен быть слишком близок к точкам остановки $\pm \sqrt{2n+1}$, представляет асимптотику полиномов Эрмита. Если x фиксировано, а $n \rightarrow \infty$, то (5) можно упростить, опустив слагаемое x^2 в подкоренных выражениях, и получить

$$H_n(x) \approx \frac{\tilde{C} \sqrt{2^{n+1}n!}}{[2\pi n]^{1/4}} e^{x^2/2} \cos\left(\sqrt{2n+1} x - \frac{\pi n}{2}\right). \quad (6)$$

Наконец, учитывая формулу Стирлинга

$$n! \approx \sqrt{2\pi} n^{n+1/2} e^{-n},$$

находим искомое асимптотическое выражение:

$$H_n(x) \approx 2^{\frac{n+1}{2}} n^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{n}{2}} e^{\frac{x^2}{2}} \cos\left(\sqrt{2n+1} x - \frac{\pi n}{2}\right)$$

(мы положили $\tilde{C} = +1$, как это следует из сравнения (6) для малых $x \rightarrow 0$ с известными значениями $H_n(0)$ и $H'_n(0)$).

9.26. Элементарное интегрирование в хорошо известном выражении для коэффициента прозрачности (коэффициента прохождения) в квазиклассическом приближении дает

$$\begin{aligned} D &\approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx\right] = \exp\left[-\frac{2}{\hbar a} \sqrt{2mU_0} \int_{-x_1}^{x_2} \sqrt{x_0^2 - x^2} dx\right] = \\ &= \exp\left[-\frac{\pi a}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{U_0}} (U_0 - E)\right], \quad x_0 = a \sqrt{1 - E/U_0} \quad (1) \end{aligned}$$

($x_2 = -x_1 \equiv x_0$ — координаты точек поворота),

Для справедливости полученного результата (1) требуется выполнение двух условий:

1) $|d\lambda(x)/dx| \ll 1$ во всей области переменной x , за исключением узких интервалов, непосредственно примыкающих к точкам поворота;

2) расстояния $\Delta x_{1,2} \equiv (x - x_{1,2})$ от точек поворота, на которых уже выполняются условия применимости квазиклассики $|d\lambda/dx| \ll 1$, должны быть такими, чтобы при этом можно было ограничиться линейным разложением потенциальной энергии

$$U(x) \approx U(x_{1,2}) + U'(x_{1,2}) \Delta x_{1,2} \quad (2)$$

(при дальнейшем увеличении $|\Delta x_{1,2}|$ выполнения условия (2), конечно, не требуется).

В рассматриваемой задаче при $|x| > a$ имеем $|d\lambda/dx| \equiv 0 \ll 1$. При $|x| < a$

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| = \frac{\hbar U_0 |x|}{\sqrt{2m} a^2 |E - U(x)|^{3/2}} = \frac{\hbar |x| a}{\sqrt{2m} U_0 |x^2 - x_0^2|^{3/2}}, \quad (3)$$

и в случае

$$\sqrt{m U_0 a^2 / \hbar^2} \gg 1 \quad (4)$$

выражение (3) много меньше единицы при всех значениях x , за исключением узких областей в окрестности точек поворота, причем ширина области неквазиклассичности по порядку величины равна

$$\Delta x = |x - x_{1,2}| \sim \frac{\hbar^{2/3} a^{1/3}}{m^{1/3}} \frac{1}{U_0^{1/6} (U_0 - E)^{1/6}} \quad (5)$$

(для получения этой оценки Δx в выражении (3) следует положить $|x| \approx x_0$ и $|x^2 - x_0^2| \equiv |x^2 - x_{1,2}^2| = |(x - x_{1,2})(x + x_{1,2})| \approx \approx 2 \Delta x x_0$). Применимость квазиклассики требует выполнения очевидного неравенства

$$\Delta x \ll x_0, \quad \text{или} \quad \frac{(U_0 - E) a \sqrt{m}}{\hbar \sqrt{U_0}} \gg 1 \quad (6)$$

(в противном случае в интервале между точками поворота $|x| < x_0$ условия применимости квазиклассики не выполнены ни при каких значениях x). Условие (6) дает, согласно (1), $D \ll 1$, что, как известно, является необходимым (но не достаточным!) условием применимости квазиклассического рассмотрения.

Условие (6) является реализацией первого из отмеченных выше условий применимости квазиклассики. Легко убедиться в том, что в рассматриваемой задаче оно почти эквивалентно (см. ниже) второму из указанных условий, налагающему ограничения на характер поведения потенциала в окрестности точек поворота. Различие этих условий проявляется лишь в случае медленных частиц, когда точки поворота приближаются к зна-

чениям $\pm a$. Очевидно, разложение (2) потенциала справедливо лишь при $|x| \leq a$ (при $|x| > a$ $U(x) \equiv 0$), так что $|\Delta x_{1,2}| \leq a - x_0$. Так как величина $(a - x_0)$ должна быть много больше интервала неквазиклассичности (5), то

$$\Delta x \ll a - x_0, \text{ или } E \gg \frac{\hbar^{2/3} U_0^{2/3}}{m^{1/3} a^{2/3}}. \quad (7)$$

Условия (4), (6), (7) определяют пределы применимости выражения (1).

Отметим, что неприменимость квазиклассического результата (1) для $D(E)$ в данной задаче при $E \rightarrow 0$ проявляется в том, что, согласно (1), $D(E=0)$ принимает хотя и малое, но конечное значение, в то время как для барьера произвольной формы имеет место *точное* равенство $D(E=0) = 0$.

9.27. Стандартная формула для коэффициента прозрачности барьера в квазиклассическом приближении

$$\begin{aligned} D &\approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx \right] = \\ &= \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(U_0 - E - U_0 x/a)} dx \right] \quad (1) \end{aligned}$$

в рассматриваемой задаче непосредственно не применима, так как в окрестности левой точки поворота $x = 0$ нарушаются условия шивания квазиклассических решений, использованные при выводе (1) (эти условия приведены в решении предыдущей задачи). Тем не менее формулу (1) можно использовать для *оценки* коэффициента прозрачности. Элементарное интегрирование дает

$$D \sim \exp \left[-\frac{4a \sqrt{2m}}{3U_0 \hbar} (U_0 - E)^{3/2} \right]. \quad (2)$$

Выражение (2) определяет коэффициент прозрачности лишь по порядку величины (или, как говорят, с точностью до предэкспоненциального множителя, который при $E \sim U_0$ имеет величину порядка единицы; следует, однако, иметь в виду, что при $E \rightarrow 0$ этот множитель обращается в нуль — см. 9.32). Однако в случае, когда под знаком экспоненты в этом выражении стоит большое по величине отрицательное число, формула (2) правильно передает основное — экспоненциальную малость коэффициента прозрачности.

9.28. Согласно формуле для коэффициента прозрачности барьера в результате элементарного интегрирования находим

$$\begin{aligned} D &\sim \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx \right] = \\ &= \exp \left\{ -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2mE} \left[\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} - \arctg \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} \right] \right\}. \end{aligned}$$

9.29. В выражении

$$D = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^x |p| dx \right] = \exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{-x_1}^{x_0} \sqrt{\frac{U_0}{E \operatorname{ch}^2(x/a)} - 1} dx \right\} \quad (1)$$

интеграл заменой переменной

$$\operatorname{sh}(x/a) = \kappa \sin t, \quad \kappa = \sqrt{U_0/E - 1},$$

приводится к виду

$$2a\kappa^2 \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^2 t dt}{1 + \kappa^2 \sin^2 t} = \pi a (\sqrt{1 + \kappa^2} - 1) = \pi a \left(\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} \right),$$

и коэффициент прозрачности оказывается равным

$$D(E) \approx \exp \left\{ -\frac{2\pi a}{\hbar} \sqrt{2m} (\sqrt{U_0} - \sqrt{E}) \right\}. \quad (2)$$

Условие применимости выражения (2) предполагает $D \ll 1$ (более точно: требуется, чтобы был велик модуль показателя экспоненты), т. е.

$$\frac{2\pi a}{\hbar} \sqrt{2m} (\sqrt{U_0} - \sqrt{E}) \gg 1. \quad (3)$$

Кроме этого имеется еще ограничение на энергию частицы E , так как при $E \rightarrow 0$ в окрестности точек поворота нарушаются стандартные условия сшивания квазиклассических решений, основанные на линейной аппроксимации потенциала и приводящие к выражению (1) для прозрачности барьера (сравнить с 9.26). Внимательный читатель легко получит, что указанное ограничение имеет вид

$$\sqrt{E} \gg \sqrt{\hbar^2/ma^2}. \quad (4)$$

Легко заметить, что при выполнении условий (3) и (4) квазиклассическое выражение (2) для коэффициента прозрачности совпадает с точным значением, найденным в 2.52.

9.30. Интеграл в показателе экспоненты в выражении для $D(E)$ заменой переменной $x = a \operatorname{sh} t$ приводится к виду ($\operatorname{sh} t_0 = \sqrt{U_0/E - 1} \equiv b^{-1}$)

$$\int_{x_1}^{x_2} |p| dx = 2a \sqrt{2m(U_0 - E)} \int_0^{t_0} \sqrt{1 - \frac{E}{U_0 - E} \operatorname{sh}^2 t} dt. \quad (1)$$

Интеграл в выражении (1) представляет собой эллиптический интеграл второго рода. При $E \ll U_0$ этот интеграл легко вычислить приближенно, если учесть, что при этом подкоренное

выражение равно единице во всем интервале интегрирования, за исключением узкой области вблизи верхнего предела интегрирования, в которой $\text{sh } t \gg 1$, и поэтому можно положить $\text{sh}^2 t \approx e^{2t}/4$ (причем во всем интервале интегрирования!), так что интеграл принимает вид

$$\int_0^z \sqrt{1 - b^2 \text{sh}^2 t} dt \approx \int_0^z \sqrt{1 - \frac{b^2}{4} e^{2t}} dt. \quad (2)$$

С помощью замены переменной $(b/2)e^t = \sin z$ интеграл (2) легко вычисляется и оказывается равным ($b \ll 1$)

$$-1 + \ln [4 \sqrt{U_0/E}]. \quad (3)$$

Таким образом,

$$D(E) \approx (E/16U_0)^{\frac{2}{\hbar} a \sqrt{2mU_0}} \exp\left(\frac{4}{\hbar} a \sqrt{2mU_0}\right). \quad (4)$$

Условиями применимости полученного результата являются

$$\frac{a}{\hbar} \sqrt{2mU_0} \gg 1, \quad E \ll \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{U_0}{m}}, \quad (5)$$

первое из которых обеспечивает применимость квазиклассики. Второе из условий (5) заменяет условие $E \ll U_0$, использованное при вычислении интеграла в выражении (1). Причина этой замены состоит в том, что при приближенном расчете величины f вида $f = e^A$, когда приближенно вычисляется значение A , для того чтобы было выполнено условие $f_{\text{точн}}/f_{\text{прибл}} \approx 1$, требуется $|A_{\text{точн}} - A_{\text{прибл}}| \ll 1$ (а не просто $A_{\text{точн}}/A_{\text{прибл}} \approx 1$, и это обстоятельство следует учитывать в случае $|A| \gg 1$). Внимательный читатель легко убедится в том, что именно второе из условий (5) (а не условие $E \ll U_0$) обеспечивает справедливость полученного значения коэффициента прозрачности.

9.31. Задачу можно решить аналогично тому, как получается известная формула для коэффициента прозрачности в квазиклассическом приближении $D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int |p| dx\right]$.

Считая для определенности, что падающие на барьер частицы движутся слева направо, представим в. ф. справа от правой точки поворота b в виде ($U(x) < E$)

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx - \frac{i\pi}{4}\right). \quad (1)$$

Соответствующая (1) в. ф. в области барьера $0 \leq x < b$ ($U(x) > E$) имеет вид

$$\Psi(x) = -\frac{iC}{\sqrt{|p|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b |p| dx\right] \quad (2)$$

(в выражении (2) мы, как обычно, пренебрегли слагаемым, экспоненциально убывающим в глубь области $x < b$). Подчеркнем, что в. ф. в области барьера в условиях данной задачи имеет вид (2) вплоть до $x = 0$ (левая точка поворота).

В. ф. при $x < 0$ имеет вид ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$)

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} (e^{ikx} + Ae^{-ikx}) \quad (3)$$

(так что коэффициент прохождения равен $D = |C|^2$).

Сшивая в. ф. (2) и (3) в точке $x = 0$ (используя непрерывность в. ф. и ее производной), имеем

$$\frac{1}{\sqrt{\hbar k}} (1 + A) = -\frac{iC}{\sqrt{|p(0)|}} D_0^{-1/2}, \quad \frac{ik}{\sqrt{\hbar k}} (1 - A) \approx \approx iC \sqrt{|p(0)|} \frac{1}{\hbar} D_0^{-1/2}, \quad (4)$$

где

$$|p(0)| = \sqrt{2m(\tilde{U}(0) - E)} \equiv \sqrt{2m(U_0 - E)},$$

$$D_0 = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^b |p| dx\right).$$

Согласно (4) легко находим значение C :

$$C = \frac{2\sqrt{|p(0)|\hbar k}}{|p(0)| - i\hbar k} D_0^{1/2},$$

а с ним и коэффициент прозрачности барьера:

$$D = 4 \frac{\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} D_0 = 4 \frac{\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^b |p| dx\right).$$

Предэкспоненциальный множитель в этом выражении при $E \sim U_0$ — порядка единицы, но при $E \rightarrow 0$ он обращается в нуль.

9.32. На основании результатов задач 9.27 и 9.31 коэффициент прозрачности барьера в квазиклассическом приближении, очевидно, равен

$$D(E) = 4 \frac{\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \exp\left[-\frac{4a\sqrt{2m}}{3\hbar U_0} (U_0 - E)^{3/2}\right]. \quad (1)$$

Условие применимости выражения (1) является выполнение неравенства

$$\frac{4a\sqrt{2m}}{3\hbar U_0} (U_0 - E)^{3/2} \gg 1. \quad (2)$$

Легко заметить, что точное значение коэффициента прозрачности рассматриваемого барьера, найденное в 2.53, при выполнении условия (2) совпадает с квазиклассическим выражением (1).

9.33. Легко убедиться (совершенно аналогично тому, как это было сделано при решении задачи 9.15) в том, что при $\nu < 2$ и $E \rightarrow 0$ на больших расстояниях x , при которых потенциал имеет асимптотическое поведение $U \sim |x|^{-\nu}$, выполнены условия применимости квазиклассики, причем при сшивании квазиклассических в. ф. в окрестности точек поворота можно ограничиться линейной аппроксимацией потенциала. Если к тому же условия применимости квазиклассики выполнены и при конечных значениях x , то при $\nu < 2$ и $E \rightarrow 0$ коэффициент прозрачности барьера определяется обычным квазиклассическим выражением

$$D = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m [U(x) - E]} dx \right].$$

Интеграл в этом выражении при $E \rightarrow 0$ расходится на больших расстояниях $|x|$. Расходящуюся часть интеграла легко вычислить. Так, на верхнем пределе интегрирования (вблизи правой точки поворота) имеем

$$\begin{aligned} \int_a^{x_2(E)} \sqrt{2m [\alpha_1/x^\nu - E]} dx &= \sqrt{2m} \alpha_1^{1/\nu} E^{-(2-\nu)/2\nu} \int_{\tilde{a} \rightarrow 0}^1 t^{-\nu/2} \sqrt{1-t^\nu} dt \equiv \\ &\equiv \sqrt{2m} \alpha_1^{1/\nu} E^{-(2-\nu)/2\nu} C_\nu \end{aligned}$$

(a — расстояние, начиная с которого потенциал при $|x| \rightarrow \infty$ уже имеет асимптотический вид; при вычислении интеграла сделана замена переменной $t = x/x_2(E) \equiv x \cdot (E/\alpha_1)^{1/\nu}$). Аналогично вычисляется расходящаяся часть на нижнем пределе интегрирования

$$\int_{x_1}^{-a} |p| dx.$$

Вклад интервала интегрирования $-a < x < a$ при $E \rightarrow 0$ является конечным. Таким образом,

$$\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx \approx \frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} C_\nu E^{-(2-\nu)/2\nu} (\alpha_1^{1/\nu} + \alpha_2^{1/\nu})$$

и соответственно (при $E \rightarrow 0$)

$$D(E) \propto \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} C_\nu E^{-(2-\nu)/2\nu} (\alpha_1^{1/\nu} + \alpha_2^{1/\nu}) \right] \rightarrow 0$$

(см. замечание по поводу точности выражений вида e^A при приближенном вычислении величины A , сделанное при решении задачи 9.30).

При $\nu > 2$ квазиклассическое выражение для $D(E)$ при $E \rightarrow 0$ неприменимо, так как при сшивании квазиклассических решений в окрестности точек остановки уже нельзя ограничиться линейным разложением потенциала. Квазиклассика приводит

к отличному от нуля значению коэффициента прозрачности $D(E=0)$, в то время как точное его значение равно нулю.

В случае $\nu=2$ квазиклассическое выражение для $D(E)$ при $E \rightarrow 0$ применимо лишь при условии $m\alpha_{1,2}/\hbar^2 \gg 1$. Энергетическая зависимость коэффициента прозрачности при этом определяется результатом задачи 9.30.

9.34. Задачу можно решить следующим образом: квазиклассические в. ф. справа и слева от точки остановки x_0 сшить с помощью точного решения у. Ш. в окрестности этой точки.

Считая для определенности, что падающие на барьер частицы движутся слева направо, имеем в. ф. в квазиклассической области при $x > x_0$ в виде

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx\right). \quad (1)$$

При $x < x_0$ (в квазиклассической области) эта функция имеет вид

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p}} \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx\right) + B \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx\right) \right\} \quad (2)$$

(так что коэффициент прозрачности равен $D = |C|^2$; $R = |B|^2$).

Решение у. Ш. в окрестности точки x_0

$$\Psi'' + \alpha(x - x_0)^2 \Psi = 0, \quad \alpha = -mU''(x_0)/\hbar^2 > 0, \quad (3)$$

представляется в виде (см. [12])

$$\Psi(x) = \sqrt{x - x_0} \left\{ C_1 H_{1/4}^{(1)}\left(\frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2\right) + C_2 H_{1/4}^{(2)}\left(\frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2\right) \right\}, \quad (4)$$

где $H^{(1,2)}$ — функции Ганкеля. Учитывая асимптотику этих функций

$$H_{1/4}^{(1,2)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp\left\{\pm i\left(z - \frac{3\pi}{8}\right)\right\}, \quad z \gg 1, \quad (5)$$

замечаем, что в области $z = \frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2 \gg 1$ справедливы как точное (4), так и квазиклассическое (1) решения (при этом предполагается, что существуют такие значения $z \gg 1$, при которых потенциал еще имеет вид $U \approx U_0 + \frac{U''(x_0)}{2}(x - x_0)^2$, и это условие определяет применимость получающегося ниже результата для D). Так как при этом $p = \hbar \sqrt{\alpha} |x - x_0|$, то сравнение (1), (4), (5) дает $C_2 = 0$, $C_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\hbar}} e^{3\pi i/8} C$, и точное решение (4) у. Ш. (3) принимает вид

$$\Psi = C_1 \sqrt{x - x_0} H_{1/4}^{(1)}\left(\frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2\right). \quad (6)$$

При использовании решения уравнения (3) в виде (6) (или (4)) следует соблюдать осторожность при переходе от значений $(x - x_0) > 0$ к $(x - x_0) < 0$, так как у функций Ганкеля $H_{1/4}^{(1,2)}(z)$ точка $z = 0$ является особой точкой — точкой ветвления. В рассматриваемой задаче при $(x - x_0) < 0$ фаза аргумента $z = \frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2$ функции Ганкеля в выражении (6) равна 2π (фаза $(x - x_0) < 0$ равна π), и в такой форме решение (6) неудобно для анализа. Его следует выразить через соответствующие цилиндрические функции от переменной с равной нулю фазой. Это легко сделать, записав (6) через функции Бесселя:

$$\Psi = C_1 \sqrt{x - x_0} \{(1 + i) J_{1/4}(z) - \sqrt{2} i J_{-1/4}(z)\}. \quad (7)$$

Так как функции Бесселя $J_\nu(z)$ имеют вид

$$J_\nu(z) = z^\nu f(z^2), \quad (8)$$

где $f(z^2)$ уже не имеет особенностей при $z = 0$, то согласно (8) имеем

$$J_{1/4}(e^{2\pi i} |z|) = i J_{1/4}(|z|), \quad J_{-1/4}(e^{2\pi i} |z|) = -i J_{-1/4}(|z|)$$

($|z|$ по определению имеет фазу, равную нулю).

Таким образом, решение (6) у.Ш. при $(x - x_0) < 0$ удобно переписать в виде (при этом $\sqrt{x - x_0} = i \sqrt{|x - x_0|}$)

$$\Psi = C_1 \sqrt{|x - x_0|} \{-(1 + i) J_{1/4}(|z|) - \sqrt{2} i J_{-1/4}(|z|)\}. \quad (9)$$

Воспользовавшись асимптотикой функции Бесселя ($|\arg z| < \pi$)

$$J_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin\left(z - \frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{4}\right),$$

запишем (9) при $|z| \gg 1$ в виде

$$\Psi = C_1 \frac{\sqrt{2|x - x_0|}}{\sqrt{\pi|z|}} \left\{ -e^{\frac{i\pi}{8} + i|z|} + (1 - i) e^{-\frac{i\pi}{8} - i|z|} \right\}. \quad (10)$$

С другой стороны, при $(x - x_0) < 0$ и $z = \frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2 \gg 1$ квазиклассическое решение (2) имеет вид (считаем, что при этом еще можно ограничиться разложением $U(x) = U(x_0) + \frac{1}{2}U''(x_0)(x - x_0)^2$, так что $p = \hbar \sqrt{\alpha}(x_0 - x)$)

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left\{ \exp\left[-\frac{i\sqrt{\alpha}(x - x_0)^2}{2}\right] + B \exp\left[\frac{i\sqrt{\alpha}(x - x_0)^2}{2}\right] \right\}. \quad (11)$$

Рассматриваемая область значений x является областью перекрытия точного (10) и квазиклассического (11) решений, что

позволяет найти значение $B = -i/\sqrt{2}$, а с ним и коэффициент отражения $R = |B|^2 = 1/2$. Таким образом, в условиях рассматриваемой задачи

$$D(E_0 = U(x_0)) = R(E_0) = 1/2.$$

Г л а в а 10

ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

10.1. Пусть χ_{s_z} *) представляют нормированные спиновые функции отдельных частиц с определенным значением s_z ; $s_z = -s, -s + 1, \dots, s$. Спиновые функции системы (не симметризованные в спинах) имеют вид $X = \chi_{s_z}^{(1)} \chi_{s'_z}^{(2)}$. Следующие ком-

бинации этих функций:

$$a) X_{s_z s'_z}^{(+)} = \chi_{s_z}^{(1)} \chi_{s'_z}^{(2)}, \quad (1)$$

$$б) X_{s_z s'_z}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \chi_{s_z}^{(1)} \chi_{s'_z}^{(2)} + \chi_{s'_z}^{(1)} \chi_{s_z}^{(2)} \}, \quad s_z \neq s'_z, \quad (2)$$

$$в) X_{s_z s'_z}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \chi_{s_z}^{(1)} \chi_{s'_z}^{(2)} - \chi_{s'_z}^{(1)} \chi_{s_z}^{(2)} \}, \quad s_z \neq s'_z, \quad (3)$$

нормированные на единицу, имеют, очевидно, определенную симметрию по отношению к перестановке спиновых переменных ($X^{(+)}$ — симметричные, $X^{(-)}$ — антисимметричные функции). Число независимых функций типа *a*) равно $(2s + 1)$, а типов *б*) и *в*), очевидно, равно $C_{2s+1}^2 = (2s + 1) 2s/2! = s(2s + 1)$. Соответственно общее число симметричных состояний — $(s + 1)(2s + 1)$, антисимметричных — $s(2s + 1)$ (а общее число всех состояний, как и следует, равно $(2s + 1)^2$).

Приведенные функции (1) — (3) не отвечают, вообще говоря, определенному значению S суммарного спина частиц. Однако, основываясь на результате задачи 3.39, можно утверждать, что состояния с $S = 2s, 2s - 2, 2s - 4, \dots$ симметричны, а с $S = 2s - 1, 2s - 3, \dots$ антисимметричны в спинах.

10.2. В случае $f_1 = f_2 = f$ пространственная часть в.ф. системы $\Phi = \varphi_f(\mathbf{r}_1) \varphi_f(\mathbf{r}_2)$ симметрична по отношению к перестановке координат $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ частиц. При этом, в соответствии с известным характером симметрии в.ф. по отношению к перестановке переменных — пространственных и спиновых — двух тождественных частиц, спиновая часть в.ф. должна быть симметричной для бозонов и антисимметричной для фермионов. Такие независимые спи-

*) В s_z -представлении эти функции имеют вид $\chi_{s_z} = \delta_{\sigma, s_z}$, где σ — переменная s_z -представления (не путать ее с с. з. s_z), пробегаящая значения $-s, -s + 1, \dots, s$. Соответственно $\chi_{s_z}^{(1)} = \delta_{\sigma_1, s_z}$, σ_1 — спиновая переменная 1-й частицы и т. д.

новые функции и их число были определены в предыдущей задаче. В. ф. возможных (независимых) состояний имеют вид

$$\Psi_{2 \text{ боз}} = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) X_{s_z s'_z}^{(+)}, \quad \Psi_{2 \text{ ферм}} = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) X_{s_z s'_z}^{(-)},$$

а их число равно $(s+1)(2s+1)$ в случае бозонов (s — целое) и $s(2s+1)$ для фермионов (s — полуцелое); см. 10.1.

В случае $f_1 \neq f_2$ пространственные в. ф. вида

$$\Phi^{(\pm)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_{f_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{f_2}(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_{f_2}(\mathbf{r}_1) \varphi_{f_1}(\mathbf{r}_2) \}$$

имеют определенную симметрию по отношению к перестановке координат частиц (в. ф. с индексом «+» — симметричная, с «—» — антисимметричная), и их комбинирование со спиновыми функциями $X^{(\pm)}$ дает в. ф. искомого состояния:

$$\begin{aligned} \Psi_{2 \text{ боз}, 1} &= \Phi^+ X_{s_z s'_z}^{(+)}, & \Psi_{2 \text{ боз}, 2} &= \Phi^{(-)} X_{s_z s'_z}^{(-)}, \\ \Psi_{2 \text{ ферм}, 1} &= \Phi^+ X_{s_z s'_z}^{(-)}, & \Psi_{2 \text{ ферм}, 2} &= \Phi^{(-)} X_{s_z s'_z}^{(+)}, \end{aligned}$$

число которых равно $(2s+1)^2$ (как в случае бозонов, так и в случае фермионов).

Отметим, что вопрос о в. ф. возможных состояний системы двух одинаковых частиц можно решить иным (и более общим) способом, использованным в следующей задаче.

10.3. С учетом спина в. ф. возможных одночастичных состояний, фигурирующих в задаче, представляются в виде $\psi_{f_i s_{z,i}} = \varphi_{f_i}(\mathbf{r}) \chi_{s_{z,i}}$, где χ_{s_z} — спиновая функция частицы, отвечающая определенной проекции спина s_z (индекс i у $s_{z,i}$ подчеркивает, что для разных орбитальных состояний проекция спина имеет свои определенные значения). Состояние системы тождественных частиц определяется указанием их распределения по одночастичным состояниям. В условиях задачи фиксирование n значений $s_{z,i}$ однозначно определяет n различных одночастичных состояний

$$\psi_{f_1, s_{z,1}}, \psi_{f_2, s_{z,2}}, \dots, \psi_{f_n, s_{z,n}} \quad (1)$$

(эти состояния — различные, так как среди f_i нет одинаковых), в каждом из которых находится одна частица.

Любое изменение набора значений $s_{z,i}$ на $s'_{z,i}$ приводит к новому набору одночастичных состояний

$$\psi_{f_1, s'_{z,1}}, \psi_{f_2, s'_{z,2}}, \dots, \psi_{f_n, s'_{z,n}} \quad (2)$$

и, соответственно, к новому состоянию системы как целого (при этом существенно, что все f_i — различные; если бы, например, $f_1 = f_2$, то при изменении значений $s_{z,i}$, состоящем во взаимной перестановке $s_{z,1}$ и $s_{z,2}$, мы не получили бы нового набора одно-

частичных состояний). Так как каждое $s_{z,i}$ принимает $2s + 1$ значений, то полное число различных наборов одночастичных состояний (типа (1), (2)) равно $(2s + 1)^n$, что и доказывает утверждение задачи.

Конкретный вид в.ф. рассматриваемых состояний системы как целого получается стандартным образом: симметризацией произведения одночастичных в.ф. (1) в случае бозонов и антисимметризацией — в случае фермионов.

10.4. Вид в.ф. зависит от того, совпадают или не совпадают друг с другом занятые одночастичные состояния. При этом следует различать три случая.

а) Все три частицы находятся в одном состоянии: $f_1 = f_2 = f_3 = f$. Нормированная на единицу Ψ -функция системы имеет вид

$$\Psi = \psi_f(\xi_1) \psi_f(\xi_2) \psi_f(\xi_3).$$

б) Два из трех занятых состояний совпадают между собой (например, для определенности, $f_1 \neq f_2 = f_3$). Тогда

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \psi_{f_1}(\xi_1) \psi_{f_2}(\xi_2) \psi_{f_2}(\xi_3) + \psi_{f_2}(\xi_1) \psi_{f_1}(\xi_2) \psi_{f_2}(\xi_3) + \psi_{f_2}(\xi_1) \psi_{f_2}(\xi_2) \psi_{f_1}(\xi_3) \}. \quad (1)$$

Вид выражения в фигурных скобках определяется симметрией в.ф. по отношению к перестановке переменных ξ любых двух частиц. Численный коэффициент $1/\sqrt{3}$ выбран из условия нормировки Ψ на единицу: $\int |\Psi|^2 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 = 1$ (интегрирование по ξ включает суммирование по спиновой переменной); при вычислении нормировочного интеграла из девяти слагаемых в $|\Psi|^2$ отличный от нуля вклад дают лишь три из-за условия ортогональности одночастичных в.ф.:

$$\int \psi_{f_i}^*(\xi) \psi_{f_k}(\xi) d\xi = \delta_{ik}.$$

в) Все три занятых состояния различны: $f_1 \neq f_2 \neq f_3 \neq f_1$. В этом случае

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \psi_{f_1}(\xi_1) \psi_{f_2}(\xi_2) \psi_{f_3}(\xi_3) + \psi_{f_1}(\xi_1) \psi_{f_3}(\xi_2) \psi_{f_2}(\xi_3) + \psi_{f_2}(\xi_1) \psi_{f_1}(\xi_2) \psi_{f_3}(\xi_3) + \psi_{f_2}(\xi_1) \psi_{f_3}(\xi_2) \psi_{f_1}(\xi_3) + \psi_{f_3}(\xi_1) \psi_{f_2}(\xi_2) \psi_{f_1}(\xi_3) + \psi_{f_3}(\xi_1) \psi_{f_1}(\xi_2) \psi_{f_2}(\xi_3) \}. \quad (2)$$

Вид в.ф. (2) определяется из соображений, приведенных в предыдущем случае.

10.5. Одночастичные состояния описываются в.ф. вида $\psi_{s_z} = \varphi(\mathbf{r}) \chi_{s_z}$, где χ_{s_z} — спиновая функция, отвечающая определенному значению $s_z = 0, \pm 1$ проекции спина. Если бы бозо-

ны не были тождественными, то независимые состояния системы описывались бы в. ф.

$$\Psi = \varphi(\mathbf{r}_1) \varphi(\mathbf{r}_2) \varphi(\mathbf{r}_3) \chi_{s_{z,1}}^{(1)} \chi_{s_{z,2}}^{(2)} \chi_{s_{z,3}}^{(3)}, \quad (1)$$

число которых составляет $3 \times 3 \times 3 = 27$.

В. ф. системы тождественных бозонов представляют комбинации в. ф. (1), симметричные по отношению к перестановке переменных любых двух частиц (в данной задаче речь идет, по существу, о перестановке спиновых переменных, так как пространственная часть в. ф. симметрична). Задавая конкретные значения $s_{z,a}$ в (1) и производя симметризацию соответствующей в. ф., легко получаем вид независимых в. ф. рассматриваемой системы. Так, для набора значений $s_{z,1} = s_{z,2} = s_{z,3} = 1$ имеем

$$\begin{aligned} \Psi_{1,1,1} &= \varphi(\mathbf{r}_1) \varphi(\mathbf{r}_2) \varphi(\mathbf{r}_3) \chi_1^{(1)} \chi_1^{(2)} \chi_1^{(3)} = \\ &= \varphi(\mathbf{r}_1) \varphi(\mathbf{r}_2) \varphi(\mathbf{r}_3) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_3; \end{aligned}$$

для набора $s_{z,1} = s_{z,2} = 1, s_{z,3} = 0$

$$\begin{aligned} \Psi_{1,1,0} &= \varphi(\mathbf{r}_1) \varphi(\mathbf{r}_2) \varphi(\mathbf{r}_3) \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \chi_1^{(1)} \chi_1^{(2)} \chi_0^{(3)} + \chi_1^{(1)} \chi_0^{(2)} \chi_1^{(3)} + \chi_0^{(1)} \chi_1^{(2)} \chi_1^{(3)} \} = \\ &= \varphi(\mathbf{r}_1) \varphi(\mathbf{r}_2) \varphi(\mathbf{r}_3) \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 + \right. \\ &\quad \left. + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_3 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_3 \right\}. \end{aligned}$$

Выпишем также все другие наборы значений $(s_{z,1}, s_{z,2}, s_{z,3})$, приводящие к независимым состояниям системы: $(1, 1, -1)$, $(1, 0, 0)$, $(1, 0, -1)$, $(1, -1, -1)$, $(0, 0, 0)$, $(0, 0, -1)$, $(0, -1, -1)$, $(-1, -1, -1)$ (наборы значений $(s_{z,1}, s_{z,2}, s_{z,3})$, отличающиеся лишь перестановкой чисел $s_{z,a}$, не приводят к новым состояниям системы). Общее число независимых состояний системы равно 10. Отметим, что из этих 10 состояний 7 соответствуют значению $S = 3$ суммарного спина системы, а 3 соответствуют $S = 1$ (см. 10.7).

10.6. Задача аналогична предыдущей. Одночастичные состояния описываются в. ф. $\psi_m = f(r) Y_{lm}(\mathbf{n})$ (Y_{lm} — шаровые функции). Если бы бозоны не были тождественными, то независимые состояния системы описывались бы в. ф. ($m_a = 0, \pm 1$)

$$\Psi = f(r_1) f(r_2) f(r_3) Y_{l m_1}(\mathbf{n}_1) Y_{l m_2}(\mathbf{n}_2) Y_{l m_3}(\mathbf{n}_3), \quad (1)$$

число которых составляет $3 \times 3 \times 3 = 27$.

Для нахождения в. ф. системы тождественных бозонов величины m_1, m_2, m_3 в выражении (1) следует рассматривать не как

квантовые числа отдельных частиц (соответственно 1, 2, 3), а как квантовые числа состояний, занятых частицами, и произвести симметризацию этого выражения. Число различных состояний системы при этом равно числу различных наборов квантовых чисел (m_1, m_2, m_3) , не сводящихся к взаимной перестановке чисел m_a .

Эти наборы имеют вид: $(1, 1, 1)$, $(1, 1, 0)$, $(1, 1, -1)$, $(1, 0, 0)$, $(1, 0, -1)$, $(1, -1, -1)$, $(0, 0, 0)$, $(0, 0, -1)$, $(0, -1, -1)$, $(-1, -1, -1)$; соответственно число независимых состояний системы равно 10.

10.7. Приведем два доказательства.

а) Рассмотрим возможные значения L суммарного момента (очевидно, $L \leq 3$). Состояние с $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ отвечает $L_z = 3$, и, таким образом, значение $L = 3$ является возможным значением момента системы. Согласно предыдущей задаче имеется только одно состояние системы с $L_z = 2$, отвечающее набору квантовых чисел $(1, 1, 0)$. Оно относится к значению $L = 3$ (для $L = 3$ есть состояние с $L_z = 2$). Таким образом, состояний с $L = 2$ в системе нет. Состояний с $L_z = 1$ — два: $(1, 1, -1)$, $(1, 0, 0)$. Существование одного состояния с $L_z = 1$ обязано значению $L = 3$. Появление второго независимого состояния с $L_z = 1$ можно объяснить только существованием состояний с $L = 1$. Семь независимых состояний с $L = 3$ и три с $L = 1$ исчерпывают все десять состояний системы, так что состояний с $L = 0$ также не существует.

б) Более изящно доказательство на основе тензорного формализма, сформулированного в задачах § 4 главы 3.

В. ф. трех независимых состояний частицы с $l = 1$ могут быть выбраны в виде $(x_i —$ компоненты \mathbf{r})

$$\psi_i = x_i f(r).$$

Соответственно для системы из трех частиц с $l = 1$ имеем в. ф. независимых состояний вида

$$\Psi_{ikl} = x_{1i} x_{2k} x_{3l} f(r_1) f(r_2) f(r_3). \quad (1)$$

В. ф. состояния с $L = 0$ является скаляром (не изменяется при вращениях). Из в. ф. (1) можно составить только одну скалярную (точнее, псевдоскалярную) функцию

$$\Psi_{L=0} = (\mathbf{r}_1 [\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3]) f(r_1) f(r_2) f(r_3). \quad (2)$$

Эта функция при перестановке координат двух частиц изменяет знак и, следовательно, не может описывать состояние системы из трех тождественных бозонов со спином $s = 0$.

10.8. Если бы частицы были различимыми, то выражение

$$d\omega = |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2$$

определяло бы вероятность нахождения первой частицы в объеме dV_1 , а второй — в объеме dV_2 . Ввиду неразличимости частиц

имеет смысл говорить лишь о вероятности нахождения одной частицы (первой или второй) внутри dV_1 и, соответственно, другой — в объеме dV_2 , так что искомая вероятность равна

$$\begin{aligned} d\omega &= |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 + |\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2 dV_1 dV_2 = \\ &= 2|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2. \end{aligned} \quad (1)$$

Для нормированной в. ф.

$$\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 = 1 \quad (2)$$

(интегрирование по координатам $\mathbf{r}_{1,2}$ проводится по всему пространству) распределение вероятностей (1) также нормировано на единицу. Действительно, при определении полной вероятности $\int d\omega$ с помощью (1) это выражение следует проинтегрировать по координатам $\mathbf{r}_{1,2}$ по всему пространству и полученный результат умножить на $1/2$, что совпадает с (2). При вычислении полной вероятности суммирование (интегрирование) должно производиться по всем независимым событиям. Указанный выше множитель $1/2$ учитывает то обстоятельство, что перестановка местами объемов dV_1 и dV_2 не приводит к новому событию (а просто дублирует исходное независимое событие).

Учитывая сказанное выше, легко приходим к выражениям, определяющим вероятности нахождения обеих частиц в одном и том же объеме:

$$\omega_1 = \int_V \int_V |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2,$$

и одной частицы в объеме V , а другой — вне этого объема:

$$\omega_2 = 2 \int_V \int_{V \text{ вне } V} |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2.$$

10.9. Нормированная в. ф. рассматриваемого состояния системы

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_2(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_2) \} \quad (1)$$

(здесь учтена ортогональность функций ψ_1 и ψ_2).

Распределение по координатам одной частицы при произвольном положении другой имеет вид

$$d\omega = \left\{ \int |\Psi(\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}, \mathbf{r}_2)|^2 dV_2 \right\} dV = \frac{1}{2} \{ |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2 \} dV \quad (2)$$

(по своей форме (2) представляет распределение по координатам первой частицы, в силу симметрии в. ф. точно такой же вид имеет распределение по координатам второй частицы; распределение же по координатам одной из двух одинаковых частиц

представляет полусумму (для нормировки на 1) указанных одностичных распределений и, ввиду их одинаковости, совпадает с каждым из них).

Используя соотношения

$$\int_{z \geq 0} |\psi_{1,2}(\mathbf{r})|^2 dV = \frac{1}{2} \int |\psi_{1,2}(\mathbf{r})|^2 dV = \frac{1}{2}, \quad (3)$$

легко находим с помощью (2), что вероятность нахождения одной частицы в области полупространства $z \geq 0$ равна $W_1(z \geq 0) = 1/2$ (при этом положение другой частицы не фиксируется), а вероятность нахождения в области $z \geq 0$ обеих частиц одновременно

$$W_2(z_{1,2} \geq 0) = \int_{z_1 > 0} \int_{z_2 > 0} |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 = \frac{1}{4} \{1 + 4|S|^2\}, \quad (4)$$

$$S = \int_{z \geq 0} \psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) dV, \quad (5)$$

что отличается от значения $1/4$ для различимых частиц (в последнем случае не требуется производить симметризацию в.ф. вида (1)). Полученный результат (4) иллюстрирует существование интерференции между различными (но тождественными!) частицами. Качественно эту интерференцию в случае бозонов можно охарактеризовать как тенденцию к взаимному сближению ($W_2 > W_{\text{разл}} = 1/4$).

10.10. Задача решается аналогично (10.9). В. ф. имеет вид

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_2(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_2)\} \chi_\alpha \chi_\beta \quad (1)$$

(α, β — спиновые переменные 1-й и 2-й частицы).

Распределение по координатам одной частицы при произвольном положении другой имеет точно такой же вид, как и в предыдущей задаче (см. формулу (2)); в данной задаче при нахождении распределения по координатам следует выполнить суммирование по спиновым переменным). Соответственно вероятность нахождения одной частицы в области $z \geq 0$ также равна $1/2$, а для вероятности нахождения в области $z \geq 0$ обеих частиц получается выражение

$$W_2(z_{1,2} \geq 0) = \frac{1}{4} \{1 - 4|S|^2\} \quad (2)$$

(сравнить с формулами (4), (5) задачи 10.9).

Полученный результат (2), как и в предыдущей задаче, иллюстрирует существование интерференции между различными тождественными частицами. Однако в случае фермионов характер интерференции противоположен тому, который имеет место для бозонов, и качественно его можно описать как тенденцию фермионов к взаимному отталкиванию.

10.11. Перейдем от переменных $\mathbf{r}_{1,2}$ к переменным $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ и $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. При этом

$$dW = |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 = \left| \Psi\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right) \right|^2 d^3R d^3r. \quad (1)$$

Выражение (1) описывает распределение по координатам центра масс и относительному расстоянию между частицами. Выполнив в нем интегрирование по координатам \mathbf{R} , получаем распределение по относительному расстоянию между частицами в виде

$$d\omega = f(\mathbf{r}) d^3r, \quad f(\mathbf{r}) = \int \left| \Psi\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right) \right|^2 d^3R. \quad (2)$$

Распределения (1), (2) при замене \mathbf{r} на $-\mathbf{r}$, что соответствует перестановке координат частиц (или изменению их нумераций), не изменяются.

Учитывая (2), замечаем, что приведенное в условии задачи выражение равно $f(\mathbf{r} = 0)$, т. е. представляет плотность вероятности нахождения частиц на расстоянии $r = 0$ друг от друга, т. е. в одной и той же точке пространства.

10.12. Как хорошо известно, в задаче двух тел переменные центра масс $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ и относительного движения $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ разделяются и в.ф. системы представляется в виде

$$\Psi_{\alpha\beta} = \psi(\mathbf{R}, t) \psi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

(или, в общем случае, в виде суперпозиции таких функций; α, β — спиновые переменные частиц).

В случае одинаковых частиц $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$. При перестановке частиц \mathbf{R} не изменяется, и условие симметричности (или антисимметричности) в.ф. вида (1) по отношению к указанной перестановке не накладывает никаких ограничений на в.ф. $\psi(\mathbf{R}, t)$, описывающую свободное движение центра масс, не зависящее от относительного движения. Требуемое условие симметрии в.ф. системы полностью переносится на в.ф. $\psi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t)$, описывающую относительное движение.

10.13. При перестановке пространственных координат двух частиц радиус-вектор $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ относительного движения изменяет знак. Такое преобразование эквивалентно отражению координат (относительно центра масс), и, учитывая известную четность $(-1)^L$ шаровых функций Y_{LM} , заключаем, что в состояниях с относительным моментом L перестановка координат $\mathbf{r}_{1,2}$ приводит к умножению в.ф. системы на $(-1)^L$ (т. е. на $+1$ для четных L и -1 для нечетных). При этом условие симметричности в.ф. тождественных бозонов требует, чтобы в четных орбитальных состояниях перестановка спиновых переменных частиц не изменяла в.ф., а в нечетных — приводила к изменению знака в.ф. Используя результат задачи 3.39, легко находим, что:

а) при $L = 0, 2, 4, \dots$ возможные значения S : $2s, 2s - 2, \dots, \dots, 0$;

б) при $L = 1, 3, 5, \dots$ возможные значения S : $2s - 1, 2s - 3, \dots, 1$.

В частности, при $s = 0$ возможны только четные значения L . Следствием этого результата является, например, запрет на распады нейтральной частицы со спином $S = 1$ (векторного мезона) на два π^0 -мезона, так как $s_\pi = 0$.

10.14. При четных значениях L возможные значения S также являются четными: $2s - 1, 2s - 3, \dots, 0$. При L нечетных S может принимать только нечетные значения: $2s, 2s - 2, \dots, 1$.

10.15. У. Ш. для относительного движения (свободное движение центра масс не представляет интереса) является у. Ш. для сферического осциллятора, которое было решено в задаче 4.23. Согласно этой задаче ($\mu = m/2$ — приведенная масса)

$$E_N = \hbar\omega(N + 3/2), \quad N = n_1 + n_2 + n_3 \quad (\omega = \sqrt{k/\mu}), \quad (1)$$

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3} = \Psi_{n_1}^{\text{осц}}(x) \Psi_{n_2}^{\text{осц}}(y) \Psi_{n_3}^{\text{осц}}(z), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (2)$$

Приведенное решение не учитывает условия квантовой механической тождественности частиц, требующего симметричности в. ф. двух тождественных бозонов со спином $s = 0$ по отношению к перестановке координат частиц. При такой перестановке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ изменяет знак, а в. ф. (2), как легко заметить, используя известную четность с. ф. гамильтониана осциллятора, умножаются на $(-1)^{n_1+n_2+n_3} = (-1)^N$. Таким образом, решения (1), (2) у. Ш. реализуются в системе тождественных бозонов только при четных $N = 0, 2, \dots$, а при нечетных N они должны быть исключены из рассмотрения. Соответственно энергетический спектр в с. ц. и. определяется выражением (1) с $N = 0, 2, 4, \dots$

10.16. Обозначим через P_{13} оператор перестановки координат 1-й и 3-й частиц. Так как в с. ц. и. $\mathbf{r}_3 = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$, то $P_{13}\mathbf{r}_1 = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$, $P_{13}\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_2$ и, соответственно, $P_{13}(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2) = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)\mathbf{r}_2$. Аналогично $P_{23}(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2) = -\mathbf{r}_1(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$. Симметризация величины $(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2)$ приводит к выражению

$$-\frac{1}{3}(\mathbf{r}_1^2 + \mathbf{r}_2^2 + \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2).$$

10.17. В. ф. состояния с $L = 0$ не изменяется при вращениях системы координат, т. е. является скалярной (или псевдоскалярной, в зависимости от того, какова четность состояния) функцией. В с. ц. и. трех частиц независимыми являются радиусы-векторы двух частиц $\mathbf{r}_{1,2}$ (при этом $\mathbf{r}_3 = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$). Из двух векторов $\mathbf{r}_{1,2}$ можно образовать следующие скалярные величины: $\mathbf{r}_1^2, \mathbf{r}_2^2, \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2$, являющиеся истинными скалярами (а не псевдоскалярами!). Скалярная функция, зависящая от вектора $\mathbf{r}_{1,2}$, может быть функцией только указанных скаляров. Соответственно в. ф.

$\Psi_{L=0}$ является функцией вида

$$\Psi_{L=0} = f(\mathbf{r}_1^2, \mathbf{r}_2^2, \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2).$$

При инверсии координат $\mathbf{r}_{1,2} \rightarrow -\mathbf{r}_{1,2}$ эта функция не изменяется: $\hat{T}\Psi_{L=0} = \Psi_{L=0}$, т. е. состояние с $L=0$ имеет положительную четность (во избежание недоразумений подчеркнем, что речь идет об орбитальной четности).

10.18. Представив оператор \hat{a} в виде

$$\hat{a} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{2} + i \frac{\hat{a} - \hat{a}^+}{2i},$$

находим коммутационное соотношение для операторов его эрмитовой $\hat{A} = \frac{1}{2}(\hat{a} + \hat{a}^+)$ и антиэрмитовой $i\hat{B} = \frac{1}{2}(\hat{a} - \hat{a}^+)$ частей: $[\hat{A}, \hat{B}] = i/2$ (учтено, что $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$).

10.19. Так как правые части коммутаторов $[\hat{p}, \hat{x}] = \hbar/i$, $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ — постоянные величины, то условию задачи можно удовлетворить, составив линейные комбинации $\hat{a} = \alpha\hat{x} + \beta\hat{p}$, $\hat{a}^+ = \alpha^*\hat{x} + \beta^*\hat{p}$ и выбрав надлежащим образом параметры α и β :

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = i\hbar(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta) = 1.$$

Выбор α, β не однозначен. Можно взять, например, $\alpha = 1/\sqrt{2} L$, $\beta = iL/\sqrt{2} \hbar$ (L — вещественный параметр, имеющий размерность длины; следует учесть, что операторы \hat{a}, \hat{a}^+ , в отличие от \hat{x} и \hat{p} , безразмерны). При этом вакуумное состояние фиктивных частиц определяется из уравнения

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad \text{или} \quad \left(\frac{x}{L} + L \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi_0(x) = 0,$$

откуда

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi L^2}} e^{-x^2/2L^2} \quad (\langle 0|0\rangle = 1).$$

10.20. Операторы \hat{a} и \hat{a}^+ действуют на функции (векторы состояния) $|\Psi\rangle$ вида

$$|\Psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle, \quad (1)$$

где символ $|n\rangle$ означает n -частичное состояние. При этом $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$. Для фермионов состояний с $n \geq 2$ не существует, и в этом случае $|n\rangle \equiv 0$ (так что в выражении (1) остаются только вакуумное $|0\rangle$ и одночастичное $|1\rangle$ состояния).

С. ф. и с. з. бозевского оператора \hat{a} определяются из решения уравнения $\hat{a}|\Psi\rangle = \alpha|\Psi\rangle$. Так как

$$\hat{a}|\Psi\rangle \equiv \hat{a} \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle,$$

то уравнение на с. ф. и с. з. принимает вид

$$\sum_{n=0}^{\infty} (c_{n+1} \sqrt{n+1} - \alpha c_n) |n\rangle = 0,$$

откуда, с учетом независимости состояний $|n\rangle$, следует

$$c_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} c_n = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} \frac{\alpha}{\sqrt{n}} c_{n-1} = \dots = \frac{\alpha^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} c_0.$$

Условие нормировки

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

дает

$$|c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2} = 1, \quad |c_0|^2 = e^{-|\alpha|^2}.$$

Полученные выше результаты означают, что с. з. бозевского оператора \hat{a} является любое комплексное число α , при этом соответствующая с. ф. может быть нормирована на 1. Распределение по числу частиц в состоянии, описываемом с. ф. оператора \hat{a} , определяется выражением

$$w_n = |c_n|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}$$

и представляет собой распределение Пуассона.

Уравнение на с. ф. и с. з. бозевского оператора \hat{a}^+ не имеет ни одного решения.

У фермиевских операторов \hat{a} , \hat{a}^+ имеется по одной с. ф.: $|0\rangle$ — с. ф. \hat{a} , $|1\rangle$ — с. ф. \hat{a}^+ ; соответствующие с. з. в обоих случаях равны 0.

10.21. Учитывая соотношения $\hat{b}^2 = 0$, $\hat{b}\hat{b}^+ + \hat{b}^+\hat{b} = 1$, находим

$$\hat{n}^2 = (\hat{b}^+\hat{b})^2 = \hat{b}^+\hat{b}(1 - \hat{b}\hat{b}^+) = \hat{b}^+\hat{b} = \hat{n}.$$

Из операторного равенства $\hat{n}^2 = \hat{n}$ вытекает, очевидным образом, соотношение для с. з. $n^2 = n$, откуда $n = 0$ или $n = 1$.

10.22. Алгебраические соотношения для операторов (в том числе коммутационные и антикоммутационные) при унитарном преобразовании сохраняют свою форму (см. 1.61). Для фермиевского оператора $\hat{a}^2 = 0$, но $\hat{a}'^2 = (\hat{a} + \alpha)^2 = 2\alpha\hat{a} + \alpha^2 \neq 0$, и поэтому указанное преобразование не является унитарным (соответственно операторы \hat{a}' , \hat{a}'^+ не имеют смысла операторов уничтожения и рождения).

Для бозевских операторов $[\hat{a}', \hat{a}'^+] = [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$, так что указанное преобразование является унитарным (подготовленному читателю предлагается самостоятельно найти явный вид уни-

тарного оператора U , осуществляющего это преобразование, $\hat{a}' = U\hat{a}U^+$.

Для анализа состояния вакуума «новых» частиц $|0'\rangle$ в терминах исходных частиц представим его в виде $|0'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$, где $|n\rangle$ описывает состояние из n исходных частиц. Уравнение, определяющее вакуумное состояние $\hat{a}'|0'\rangle = 0$, можно записать в виде $\hat{a}|0'\rangle = -\alpha|0'\rangle$. В такой форме его можно рассматривать формально как уравнение на с. ф. и с. з. оператора \hat{a} ($-\alpha$ — с. з., $|0'\rangle$ — с. ф.). Это уравнение было решено в задаче 10.20, к которой мы и отсылаем читателя. Распределение по числу исходных частиц в состоянии $|0'\rangle$ имеет вид

$$w_n = |c_n|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}.$$

10.23. Для фермиевских операторов рассматриваемое преобразование является унитарным при выполнении условий $\hat{a}'^2 = (\alpha\hat{a} + \beta\hat{a}^+)^2 = \alpha\beta = 0$ и $[\hat{a}', \hat{a}'^+]_+ = \alpha^2 + \beta^2 = 1$, т. е. только в тривиальном случае $\alpha = \pm 1, \beta = 0$ (или $\alpha = 0, \beta = \pm 1$; см. следующую задачу).

Для бозевских операторов преобразование является унитарным при выполнении одного условия: $\alpha^2 - \beta^2 = 1$ (при этом $\beta^2/\alpha^2 < 1$ и $\alpha^2 \geq 1$).

Представив в бозевском случае состояние $|0'\rangle$ в виде

$$|0'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$

и учтя соотношения $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$, запишем уравнение, определяющее состояние $|0'\rangle$ ($\hat{a}'|0'\rangle = 0$), в виде

$$\begin{aligned} \hat{a}'|0'\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} (\alpha c_n \sqrt{n} |n-1\rangle + \beta c_n \sqrt{n+1} |n+1\rangle) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (\alpha \sqrt{n+1} c_{n+1} + \beta \sqrt{n} c_{n-1}) |n\rangle = 0 \quad (c_{-1} = 0). \end{aligned}$$

Отсюда

$$c_{n+1} = -\frac{\beta}{\alpha} \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{n+1}} c_{n-1}. \quad (1)$$

Согласно (1) для нечетных n $c_n = 0$; для четных $n = 2k$ имеем

$$c_{2k} = -\frac{\beta}{\alpha} \frac{\sqrt{2k-1}}{\sqrt{2k}} c_{2k-2} = \dots = \left(-\frac{\beta}{\alpha}\right)^k \sqrt{\frac{(2k-1)!!}{2^k k!}} c_0.$$

Определяя c_0 из условия нормировки $\langle 0' | 0' \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1$:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 &= \sum_{k=0}^{\infty} |c_{2k}|^2 = |c_0|^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{2^k k!} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{2k} = \\ &= |c_0|^2 \frac{1}{\sqrt{1 - (\beta/\alpha)^2}} = |\alpha| |c_0|^2 = 1, \end{aligned}$$

получаем распределение по числу исходных частиц в состоянии вакуума «новых» частиц в виде

$$\omega_n = |c_n|^2 = \begin{cases} \frac{(n-1)!!}{n!!} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n \frac{1}{|\alpha|}, & n - \text{четное,} \\ 0, & n - \text{нечетное.} \end{cases}$$

10.24. В случае фермиевских операторов указанное преобразование является унитарным, так как сохраняются их основные свойства: $(\hat{a}')^2 = (\hat{a}'^+)^2 = 0$, $[\hat{a}', \hat{a}'^+]_+ = 1$. Очевидно, вакуумным состоянием «новых» частиц $|0'\rangle$ является одночастичное состояние исходных частиц $|1\rangle$ и, наоборот, одночастичным состоянием «новых» частиц $|1'\rangle$ является вакуумное состояние $|0\rangle$ исходных. Такие «новые» частицы можно назвать дырками (на фоне исходных частиц).

В случае бозевских операторов преобразование не является унитарным, так как $[\hat{a}', \hat{a}'^+] = -1$ (в отличие от $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$), и операторы \hat{a}' , \hat{a}'^+ нельзя рассматривать как операторы уничтожения и рождения.

10.25. Символическое соотношение $|1\rangle = \sum_{\vec{f}} C_{\vec{f}} \hat{a}_{\vec{f}}^+ |0\rangle$ эквивалентно представлению в. ф. Ψ произвольного одночастичного состояния в виде суперпозиции в. ф. $\Psi_{\vec{f}}$ состояний частицы с определенными значениями квантовых чисел f : $\Psi = \sum_{\vec{f}} C_{\vec{f}} \Psi_{\vec{f}}$. Таким образом, $C_{\vec{f}}$ является в. ф. рассматриваемого состояния в f -представлении.

Так как оператор $\hat{\Psi}^+(\mathbf{r})$ рождает частицу в точке \mathbf{r} , то $\varphi(\mathbf{r})$ является в. ф. в координатном представлении ($f \equiv \mathbf{r}$).

10.26. Очевидно, операторы $\hat{a}_{f_i}^+$ и $\hat{a}_{g_k}^+$ (и соответственно \hat{a}_{f_i} и \hat{a}_{g_k}) связаны линейными соотношениями:

$$\hat{a}_{f_i}^+ = \sum_k C(f_i, g_k) \hat{a}_{g_k}^+, \quad \hat{a}_{f_i} = \sum_k C^*(f_i, g_k) \hat{a}_{g_k}. \quad (1)$$

Для определения $C(f_i, g_k)$ применим операторное равенство (1) к вакуумному состоянию

$$\hat{a}_{f_i}^+ |0\rangle = \sum_k C(f_i, g_k) \hat{a}_{g_k}^+ |0\rangle.$$

Это равенство эквивалентно соотношению между в. ф. (см. предыдущую задачу)

$$\Psi_{f_i} = \sum_k C(f_i, g_k) \Psi_{g_k}, \quad (2)$$

где $\Psi_{f_i}(g_k)$ — соответствующие с. ф. операторов, входящих в полные наборы f, g . Согласно (2) находим

$$C(f_i, g_k) = \int \Psi_{g_k}^* \Psi_{f_i} d\tau.$$

Отметим, что $C(f_i, g_k)$ являются с. ф. Ψ_{f_i} в g -представлении. Аналогично легко прийти к соотношениям

$$\hat{a}_{g_k}^+ = \sum_i C^*(f_i, g_k) \hat{a}_{f_i}^+, \quad \hat{a}_{g_k} = \sum_i C(f_i, g_k) \hat{a}_{f_i}.$$

10.27. Если $f_1 \neq f_2$, то указанный в условии вектор состояния $|2\rangle = \hat{a}_{f_1}^+ \hat{a}_{f_2}^+ |0\rangle$ нормирован на единицу:

$$\begin{aligned} \langle 2|2\rangle &= \langle 0 | \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{a}_2 (1 \pm \hat{a}_1^+ \hat{a}_1) \hat{a}_2^+ | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | 1 \pm \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 \pm \hat{a}_2 \hat{a}_1^+ (\pm \hat{a}_2^+ \hat{a}_1) | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1 \end{aligned}$$

(для краткости пишем \hat{a}_1 вместо \hat{a}_{f_1} и т. д., знаки «+» и «-» относятся соответственно к бозонам и фермионам).

В случае $f_1 = f_2 \equiv f$ нормированное двухчастичное бозонное состояние имеет вид $|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_f^+)^2 |0\rangle$, а аналогичного фермионного состояния не существует.

Обозначив через $\Psi_{f_i}(\xi)$ ($\xi = r, \alpha$; α — спиновая переменная) нормированные на единицу в. ф. одночастичных состояний, можно записать нормированные в. ф. рассматриваемых двухчастичных состояний в координатном представлении в виде

$$a) f_1 \neq f_2, \quad \Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_{f_1}(\xi_1) \Psi_{f_2}(\xi_2) \pm \Psi_{f_2}(\xi_1) \Psi_{f_1}(\xi_2) \};$$

$$б) f_1 = f_2 \equiv f, \quad \Psi(\xi_1, \xi_2) = \Psi_f(\xi_1) \Psi_f(\xi_2).$$

Приведенный вид в. ф. следует непосредственно из смысла представления чисел заполнения, автоматически учитывающего условие квантовомеханической неразличимости тождественных частиц.

10.28. В случае различных наборов квантовых чисел f_1, f_2, f_3 указанное трехчастичное состояние нормировано: $\langle 3|3\rangle = 1$ (как для бозонов, так и для фермионов; сравнить с 10.27). В. ф. системы в координатном представлении выражается симметризованным (или антисимметризованным) произведением в. ф. $\Psi_{f_i}(\xi)$ одночастичных состояний. Для случая бозонов явный вид такой функции приведен в решении задачи 10.4 (формула (2)).

Для фермионов явный вид в. ф. может быть легко найден из представления ее в виде детерминанта

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \psi_{f_1}(\xi_1) & \psi_{f_1}(\xi_2) & \psi_{f_1}(\xi_3) \\ \psi_{f_2}(\xi_1) & \psi_{f_2}(\xi_2) & \psi_{f_2}(\xi_3) \\ \psi_{f_3}(\xi_1) & \psi_{f_3}(\xi_2) & \psi_{f_3}(\xi_3) \end{vmatrix}.$$

10.29. Для системы из N частиц рассматриваемые операторы в конфигурационном пространстве имеют вид

$$\hat{H} = \sum_a \frac{\hat{p}_a^2}{2m}, \quad \hat{P} = \sum_a \hat{p}_a, \quad \hat{R}_{\text{ц. н.}} = \frac{1}{N} \sum_a \hat{r}_a = \frac{1}{N} \sum_a r_a, \quad (1)$$

где суммы берутся по всем частицам системы. Эти операторы действуют в пространстве в. ф. $\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ ($\xi = r, \alpha$; α — спиновая переменная).

Операторы (1) выражаются через сумму одночастичных операторов, т. е. имеют вид $\sum_a \hat{f}(\xi_a)$. По общему правилу (см., например, [3]) вид таких операторов в представлении чисел заполнения, F , определяется выражением

$$\hat{F} = \int \hat{\Psi}^+(\xi) \hat{f} \hat{\Psi}(\xi) d\xi, \quad (2)$$

где $\hat{\Psi}(\xi)$ — оператор поля (или Ψ -оператор), являющийся оператором уничтожения частицы в точке r и в соответствующем спиновом состоянии (оператор $\hat{\Psi}^+(\xi)$ рождает частицу).

Оператор (2) можно также выразить через операторы рождения и уничтожения \hat{a}_i^+, \hat{a}_i частицы в состояниях $\psi_{g_i}(\xi)$, определяемых квантовыми числами g_i некоторого (произвольного) полного набора

$$\hat{F} = \sum_{i, k} f_{ik} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k \equiv \sum_k \hat{a}_k^+ \hat{f} \hat{a}_k, \quad (3)$$

где матричные элементы

$$f_{ik} = \int \psi_{g_i}^*(\xi) \hat{f} \psi_{g_k}(\xi) d\xi$$

определяют одночастичный оператор (матрицу) f в g -представлении. В этом смысле выражение (2) является частным случаем (3), соответствующим использованию в (3) координатного представления (при этом в роли \hat{a}_{g_i} выступают операторы $\hat{a}_{r, \alpha} \equiv \hat{\Psi}(\xi)$). Если же в выражении (3) воспользоваться импульсным представлением, то оператор \hat{F} принимает вид

$$\hat{F} = \sum_{\rho, \sigma} \hat{a}_{\rho\sigma}^+ \hat{f} \hat{a}_{\rho\sigma} = \sum_{\rho, \sigma, \rho', \sigma'} (f)_{\rho\sigma}^{\rho'\sigma'} \hat{a}_{\rho'\sigma'}^+ \hat{a}_{\rho\sigma} \quad (4)$$

(σ характеризует спиновое состояние; например, $\sigma \equiv s_z$).

Используя явный вид оператора импульса \hat{p} , находим по формулам (1), (2), (4) искомые операторы в представлении чисел

заполнения:

$$a) \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \hat{\Psi}^+(\xi) \Delta \hat{\Psi}(\xi) d\xi = \sum_{p, \sigma} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{p\sigma}^+ \hat{a}_{p\sigma};$$

$$б) \hat{P} = -i\hbar \int \hat{\Psi}^+(\xi) \nabla \hat{\Psi}(\xi) d\xi = \sum_{p, \sigma} p \hat{a}_{p\sigma}^+ \hat{a}_{p\sigma};$$

$$в) \hat{R}_{ц.н} = \frac{1}{N} \int \hat{\Psi}^+(\xi) \mathbf{r} \hat{\Psi}(\xi) d\xi.$$

10.30. Исследование временной эволюции физических систем в схеме вторичного квантования можно проводить, используя различные представления: шредингеровское, гайзенберговское и представление взаимодействия. В шредингеровском представлении чисел заполнения операторы, вообще говоря, не зависят от времени, а в ф. состоянии системы Φ^* (ее аргументами являются числа заполнения различных состояний и время) удовлетворяет у. Ш. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi = \hat{H} \Phi$, где \hat{H} — гамильтониан системы в представлении чисел заполнения. При этом явный вид оператора \hat{F} (в случае, если F не зависит явно от времени) определяется коммутатором $\hat{F} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$ (все операторы в этом выражении действуют на функции в пространстве чисел заполнения).

В рассматриваемой задаче

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \hat{\Psi}^+(\xi) \Delta \hat{\Psi}(\xi) d\xi, \quad \hat{R}_{ц.н} = \frac{1}{N} \int \hat{\Psi}^+(\xi') \mathbf{r}' \hat{\Psi}(\xi') d\xi',$$

так что

$$\hat{V}_{ц.н} = \hat{R}_{ц.н} = -\frac{i\hbar}{2mN} \left\{ \int \hat{\Psi}^+(\xi) \Delta \hat{\Psi}(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') \mathbf{r}' \hat{\Psi}(\xi') d\xi d\xi' - \int \hat{\Psi}^+(\xi') \mathbf{r}' \hat{\Psi}(\xi') \hat{\Psi}^+(\xi) \Delta \hat{\Psi}(\xi) d\xi d\xi' \right\}. \quad (1)$$

Используя соотношения

$$\hat{\Psi}(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') = \delta(\xi - \xi') \pm \hat{\Psi}^+(\xi') \hat{\Psi}(\xi)$$

(где знак «+» для бозонов, «-» для фермионов), запишем (1) в виде

$$\begin{aligned} \hat{V}_{ц.н} = & -\frac{i\hbar}{2mN} \left\{ \int \hat{\Psi}^+(\xi) \Delta \delta(\xi - \xi') \mathbf{r}' \hat{\Psi}(\xi') d\xi d\xi' - \right. \\ & \left. - \int \hat{\Psi}^+(\xi') \mathbf{r}' \delta(\xi - \xi') \Delta \hat{\Psi}(\xi) d\xi d\xi' \right\} \mp \\ & \mp \frac{i\hbar}{2mN} \left\{ \int \hat{\Psi}^+(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') \Delta \mathbf{r}' \hat{\Psi}(\xi) \hat{\Psi}(\xi') d\xi d\xi' - \right. \\ & \left. - \int \hat{\Psi}^+(\xi') \hat{\Psi}^+(\xi) \mathbf{r}' \Delta \hat{\Psi}(\xi') \hat{\Psi}(\xi) d\xi d\xi' \right\}. \quad (2) \end{aligned}$$

*) Не путать в. ф. Φ с операторами $\hat{\Psi}, \hat{\Psi}^+$

Так как $\hat{\Psi}^+(\xi')\hat{\Psi}^+(\xi) = \pm \hat{\Psi}^+(\xi)\hat{\Psi}^+(\xi')$, $\hat{\Psi}(\xi')\hat{\Psi}(\xi) = \pm \hat{\Psi}(\xi)\hat{\Psi}(\xi')$ и $\Delta\mathbf{r}' = \mathbf{r}'\Delta$, то легко заметить, что последние два слагаемых в (2) в сумме дают нуль и выражение (2) оказывается равным

$$\hat{\mathbf{V}}_{п. и} = -\frac{i\hbar}{2mN} \int \hat{\Psi}^+(\xi)(\Delta\mathbf{r} - \mathbf{r}\Delta)\hat{\Psi}(\xi) d\xi. \quad (3)$$

Используя равенство $\Delta\mathbf{r} - \mathbf{r}\Delta = [\Delta, \mathbf{r}] = 2\nabla$, запишем выражение (3) в виде

$$mN\hat{\mathbf{V}}_{п. и} = -i\hbar \int \hat{\Psi}^+(\xi)\nabla\hat{\Psi}(\xi) d\xi = \hat{\mathbf{P}} \quad (4)$$

($\hat{\mathbf{P}}$ — оператор импульса системы в представлении чисел заполнения), имеющем очевидный физический смысл.

10.31. В классической физике плотность числа частиц в точке \mathbf{r} пространства равна

$$n(\mathbf{r}) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a), \quad (1)$$

т.е. является физической величиной, зависящей только от координат \mathbf{r}_a частиц (но не от их импульсов!) и вектора \mathbf{r} , рассматриваемого как некоторый параметр.

Квантовомеханическим обобщением выражения (1) является оператор плотности числа частиц вида (в координатном представлении)

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \quad (2)$$

(сравнить с оператором потенциальной энергии $\hat{U}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})$).

Оператор (2) имеет вид суммы одночастичных операторов $\hat{f}_a = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)$, и его вид в представлении чисел заполнения определяется по общему правилу, приведенному в решении задачи 10.29:

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \int \hat{\Psi}^+(\xi')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\hat{\Psi}(\xi') d\xi' = \sum_{s_z} \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, s_z)\hat{\Psi}(\mathbf{r}, s_z) \quad (3)$$

(напомним, что $\int d\xi$ означает интегрирование по координатам и суммирование по спиновой переменной, в качестве которой выбрана величина s_z). Отдельные слагаемые суммы (3): $\hat{n}(\mathbf{r}, s_z) = \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, s_z)\hat{\Psi}(\mathbf{r}, s_z)$ — представляют операторы плотности числа частиц с определенной проекцией спина s_z .

Операторы $\hat{N}(v)$ — числа частиц и $\hat{N}(v, s_z)$ — числа частиц с определенной проекцией спина s_z в объеме v , очевидно, имеют вид

$$\hat{N}(v) = \sum_{s_z} \hat{N}(v, s_z), \quad \hat{N}(v, s_z) = \int_v \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, s_z)\hat{\Psi}(\mathbf{r}, s_z) d^3r. \quad (4)$$

При интегрировании в (4) по всему пространству получают̄ся операторы полного числа частиц в системе.

10.32. Оператор $\hat{\mathbf{P}}$ имеет вид (см., например, 10.29)

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \int \hat{\Psi}^+(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \hat{\Psi}(\xi') d\xi'.$$

Используя коммутационные соотношения для бозонных Ψ -операторов $[\hat{\Psi}(\xi), \hat{\Psi}(\xi')]_- = [\hat{\Psi}^+(\xi), \hat{\Psi}^+(\xi')]_- = 0$, $[\hat{\Psi}(\xi), \hat{\Psi}^+(\xi')]_- = \delta(\xi - \xi')$, легко находим

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\Psi}(\xi)]_- &= \hat{\mathbf{P}}\hat{\Psi}(\xi) - \hat{\Psi}(\xi)\hat{\mathbf{P}} = \\ &= -i\hbar \int \hat{\Psi}^+(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \hat{\Psi}(\xi') d\xi' \hat{\Psi}(\xi) + i\hbar \hat{\Psi}(\xi) \int \hat{\Psi}^+(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \hat{\Psi}(\xi') d\xi' = \\ &= -i\hbar \int \left\{ \hat{\Psi}^+(\xi') \hat{\Psi}(\xi) - \hat{\Psi}(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') \right\} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \hat{\Psi}(\xi') d\xi' = \\ &= i\hbar \int \delta(\xi - \xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \hat{\Psi}(\xi') d\xi' = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{\Psi}(\xi). \quad (1) \end{aligned}$$

Аналогично получаем

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\Psi}^+(\xi)]_- &= -i\hbar \int \hat{\Psi}^+(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \delta(\xi - \xi') d\xi' = \\ &= i\hbar \int \hat{\Psi}^+(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \delta(\xi - \xi') d\xi' = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{\Psi}^+(\xi). \quad (2) \end{aligned}$$

Учитывая антикоммутационные соотношения для фермионных Ψ -операторов

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(\xi), \hat{\Psi}(\xi')]_+ &= [\hat{\Psi}^+(\xi), \hat{\Psi}^+(\xi')]_+ = 0, \\ [\hat{\Psi}(\xi), \hat{\Psi}^+(\xi')]_+ &= \delta(\xi - \xi'), \end{aligned}$$

легко сообразить, что соотношения (1), (2) непосредственно переносятся и на случай фермионных операторов поля.

10.33. а) Решение этим способом основано на равенстве $\hat{F}^2 = F^2 = F F$. Так как по условию $\hat{F} = \sum_a \hat{f}(\xi_a)$, то по общему правилу, приведенному в решении задачи 10.29, имеем

$$\hat{F}^2 = \left\{ \int \hat{\Psi}^+(\xi) \hat{f}(\xi) \Psi(\xi) d\xi \right\}^2. \quad (1)$$

б) Оператор $\hat{A} = \sum_a \hat{f}^2(\xi_a)$ — оператор аддитивной величины (не путать его с \hat{F}^2 !) — в представлении чисел заполнения имеет вид

$$\hat{A} = \int \hat{\Psi}^+(\xi) \hat{f}(\xi) \hat{f}(\xi) \hat{\Psi}(\xi) d\xi.$$

Его можно записать также в виде

$$\hat{A} = \int \hat{\Psi}^+(\xi) f(\xi) \delta(\xi - \xi') f(\xi') \hat{\Psi}(\xi') d\xi d\xi'. \quad (2)$$

Оператор $\hat{B} = \sum_{a \neq b} f(\xi_a) f(\xi_b)$ является симметричным двух-частичным оператором, и согласно общим правилам (см., например, [3]) он в представлении чисел заполнения имеет вид

$$\hat{B} = \int \hat{\Psi}^+(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') f(\xi) f(\xi') \hat{\Psi}(\xi') \hat{\Psi}(\xi) d\xi d\xi'. \quad (3)$$

Так как $\hat{\Psi}(\xi') \hat{\Psi}(\xi) = \pm \hat{\Psi}(\xi) \hat{\Psi}(\xi')$ («+» для бозонов, «-» для фермионов), то (3) можно записать в виде

$$\hat{B} = \pm \int \hat{\Psi}^+(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') f(\xi) f(\xi') \hat{\Psi}(\xi) \hat{\Psi}(\xi') d\xi d\xi'. \quad (4)$$

Учитывая перестановочность операторов: $f(\xi') \hat{\Psi}(\xi) = \hat{\Psi}(\xi) f(\xi')$ ($f(\xi')$ — оператор лишь в конфигурационном пространстве, действующий на переменные ξ' , но не ξ), перепишем (4) следующим образом:

$$\hat{B} = \pm \int \hat{\Psi}^+(\xi) f(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') \hat{\Psi}(\xi) f(\xi') \hat{\Psi}(\xi') d\xi d\xi'.$$

Наконец, воспользовавшись соотношением $\pm \hat{\Psi}^+(\xi') \hat{\Psi}(\xi) = \hat{\Psi}(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') - \delta(\xi - \xi')$, имеем

$$\begin{aligned} \hat{B} = & \int \hat{\Psi}^+(\xi) f(\xi) \hat{\Psi}(\xi) \hat{\Psi}^+(\xi') f(\xi') \hat{\Psi}(\xi') d\xi d\xi' - \\ & - \int \hat{\Psi}^+(\xi) f(\xi) \delta(\xi - \xi') f(\xi') \hat{\Psi}(\xi') d\xi d\xi'. \end{aligned} \quad (5)$$

Так как $F^2 = \hat{A} + \hat{B}$, то, используя (2) и (5), приходим к полученному выше другим способом выражению (1) для \hat{F}^2 .

10.34. Так как операторы плотности числа частиц $\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{s_2} \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, s_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, s_2)$ (см. 10.31) в различных точках пространства коммутируют друг с другом: $[\hat{n}(\mathbf{r}_1), \hat{n}(\mathbf{r}_2)]_- = 0$ (читателю предлагается самостоятельно убедиться в этом), то искомый оператор представляет произведение

$$\hat{n}(\mathbf{r}_1) \hat{n}(\mathbf{r}_2) = \sum_{s_2, s_2'} \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1, s_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1, s_2) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2, s_2') \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2, s_2'). \quad (1)$$

Оператор (1) является, как и следует, эрмитовым.

10.35. В операторе плотности числа частиц $\hat{n}(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r})$ (см. 10.31) выразим $\hat{\Psi}$ -операторы через операторы уничтожения $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ и рождения $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ ($\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ — импульс частицы):

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+,$$

так что

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2}. \quad (1)$$

Средняя плотность числа частиц $\overline{n(\mathbf{r})}$ получается усреднением оператора (1) по основному состоянию бозе-газа $|\Psi_0\rangle = |N_{\mathbf{k}=0}, 0_{\mathbf{k} \neq 0}\rangle$ (в основном состоянии все частицы имеют равный нулю импульс, так что числа заполнения возбужденных состояний $n_{\mathbf{k} \neq 0} = 0$). Очевидно,

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} | \Psi_0 \rangle = \begin{cases} N, & \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = 0, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

и для \bar{n} получается естественный результат: $\bar{n} = N/V$.

Среднее число частиц в объеме v получается усреднением соответствующего оператора $\hat{N}(v) = \int_v \hat{n}(\mathbf{r}) d^3r$:

$$\overline{N(v)} \equiv \langle \Psi_0 | \hat{N}(v) | \Psi_0 \rangle = \int_v \langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle d^3r = \frac{Nv}{V}. \quad (2)$$

Для расчета флуктуации числа частиц усредним оператор $\hat{N}^2(v)$ по состоянию $|\Psi_0\rangle$. Так как

$$\begin{aligned} \hat{N}^2(v) &= \hat{N}(v) \hat{N}(v) = \\ &= \frac{1}{V^2} \int_v \int_v \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}'} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4} d^3r d^3r', \end{aligned} \quad (3)$$

то для вычисления $\langle \Psi_0 | \hat{N}^2(v) | \Psi_0 \rangle$ прежде всего найдем

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4} | \Psi_0 \rangle. \quad (4)$$

Используя явный вид $|\Psi_0\rangle$, нетрудно сообразить, что величины (4) отличны от нуля лишь при выполнении условий $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_4 = 0$, $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3$; при этом они равны N^2 для $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 = 0$ и N для $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 = \mathbf{k} \neq 0$. Значение $\overline{N^2(v)}$ представляется в виде

$$\overline{N^2(v)} = \frac{1}{V^2} \int_v \int_v \left\{ N^2 + N \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \right\} d^3r d^3r'. \quad (5)$$

Так как

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \frac{1}{V} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} - 1 \right\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{V} \quad (6)$$

(в (6) мы учли условие полноты системы функций $\Psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$), то интеграл в выражении (5) элементарно вычисляется, и оно принимает вид

$$\overline{N^2(v)} = \frac{N^2 v^2}{V^2} + \frac{Nv}{V} - \frac{Nv^2}{V^2}. \quad (7)$$

Соответственно

$$\overline{(\Delta N(v))^2} = \overline{N^2(v)} - \bar{N}^2(v) = \frac{Nv}{V} \left(1 - \frac{v}{V}\right). \quad (8)$$

При $v = V$ имеем $\overline{(\Delta N(V))^2} = 0$ — очевидный результат, так как полное число частиц в системе равно N и не флуктуирует. В случае $v \ll V$ имеем согласно (8) $\overline{(\Delta N(v))^2} \approx Nv/V = \bar{N}(v)$.

Отметим, что для системы из N невзаимодействующих классических частиц, находящихся в объеме V , распределение по числу частиц N_v в объеме v имеет вид

$$W(N_v) = \frac{N!}{N_v!(N-N_v)!} \left(\frac{v}{V}\right)^{N_v} \left(1 - \frac{v}{V}\right)^{N-N_v}$$

(так называемое биномиальное распределение). Вычисление для такого распределения средних значений \bar{N}_v , $\overline{N_v^2}$, $\overline{(\Delta N_v)^2}$ приводит к результатам, в точности совпадающим с полученными выше (2), (7), (8) (см. по этому поводу следующую задачу).

10.36. Решение данной задачи аналогично проведенному в 10.35 вычислению значения $\overline{N^2(v)}$. Оператор величины $n_1 n_2$ имеет вид (см. 10.34)

$$\begin{aligned} \hat{n}_1 \hat{n}_2 &= \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) = \\ &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \frac{1}{V^2} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}_1 + i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4}, \end{aligned}$$

и его среднее значение

$$\overline{n_1 n_2} = \langle \Psi_0 | \hat{n}_1 \hat{n}_2 | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{V^2} \left\{ N^2 + N \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \right\} \quad (1)$$

непосредственно следует из найденного в предыдущей задаче значения матричного элемента (4).

Суммирование в (1) легко выполняется с помощью формулы (6) предыдущей задачи (при этом δ -функциональное слагаемое обращается в нуль, так как $\mathbf{r}_1 \neq \mathbf{r}_2$), так что

$$\overline{n_1 n_2} = \frac{N^2}{V^2} - \frac{N}{V^2}, \quad (2)$$

и функция корреляции оказывается равной

$$v = -\frac{N}{nV^2} = -\frac{1}{V} = -\frac{\bar{n}}{N}. \quad (3)$$

Чтобы лучше понять полученные результаты (2), (3), найдем аналогичные им характеристики для случая невзаимодействующих классических частиц. Для этого рассмотрим величину $\overline{n_1 dV_1 n_2 dV_2}$, где $dV_{1,2}$ — бесконечно малые объемы в окрестности точек $\mathbf{r}_{1,2}$. Так как $n dV$ — число частиц в объеме dV , то рассматриваемая величина представляет среднее значение произведения чисел частиц в объемах $dV_{1,2}$. Ввиду малости $dV_{1,2}$

можно пренебречь вероятностями того, что в этих объемах находится более чем по одной частице (с подавляющей вероятностью в этих малых объемах вообще нет частиц), так что

$$\overline{\dot{n}_1 dV_1 n_2 dV_2} = \sum_{N_1, N_2} N_1 N_2 W(N_1, N_2) \approx W(1, 1), \quad (4)$$

где $W(N_1, N_2)$ — вероятность того, что в объемах $dV_{1,2}$ находятся $N_{1,2}$ частиц. Для вычисления $W(1, 1)$ замечаем, что вероятность нахождения определенной частицы в объеме dV_1 равна dV_1/V , а просто одной частицы (безразлично какой) — в N раз больше, т.е. $N dV_1/V$; умножив эту величину на вероятность того, что какая-то из остальных $(N-1)$ частиц при этом находится в объеме dV_2 , равную $(N-1) dV_2/V$, находим

$$W(1, 1) = \frac{N(N-1)}{V^2} dV_1 dV_2. \quad (5)$$

Из (4) и (5) следует $\overline{n_1 n_2} = \frac{N^2}{V^2} - \frac{N}{V^2}$, что совпадает с выражением (2).

Расчет $n_1 n_2$ для классических частиц выявляет причину отличия этой величины от значения $\bar{n}_1 \bar{n}_2 = \bar{n}^2$: при вычислении плотности числа частиц сразу в двух различных точках в каждой из них в среднем плотность меньше \bar{n} , так как часть частиц заведомо находится вблизи другой точки. Однако для макроскопических систем значение N огромно, так что второе слагаемое в правой части (2) пренебрежимо мало; соответственно функция корреляции $v = 0$.

Характеристики бозе-газа в основном состоянии, рассмотренные в данной и предыдущей задачах, оказались такими же, как у газа классических частиц. Это не случайно. Действительно, в. ф. основного состояния имеет вид

$$\Psi = \psi_0(\mathbf{r}_1) \psi_0(\mathbf{r}_2) \dots \psi_0(\mathbf{r}_N), \quad \psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}},$$

т.е. представляет произведение в. ф. отдельных частиц, точно так же как в случае различимых частиц. Соответственно частицы не интерферируют друг с другом, а для каждой из них $|\psi_0|^2 = 1/V$, что соответствует равновероятному распределению их по объему.

10.37. Задача решается аналогично 10.35. Оператор $\hat{n}(\mathbf{r})$ имеет вид

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \sigma} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma} \quad (1)$$

($\sigma \equiv s_z$). Основное состояние ферми-газа определяется числами заполнения, равными $n_{\mathbf{k}_a \sigma} = 1$ для $|\mathbf{k}_a| < k_F$ и $n_{\mathbf{k}_a \sigma} = 0$

для $|\mathbf{k}_a| > k_F$, т. е.

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{|\mathbf{k}_a| < k_F, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}_a \sigma}^+ |0\rangle,$$

где k_F находится из условия

$$\sum_{|\mathbf{k}_a| < k_F, \sigma} 1 = (2s+1) \int_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{(2s+1) V k_F^3}{6\pi^2} = N, \quad (2)$$

$$k_F = \left[\frac{6\pi^2 N}{(2s+1)V} \right]^{1/3}.$$

Очевидно, матричный элемент $\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma} | \Psi_0 \rangle$ отличен от нуля (и равен при этом 1) лишь в случае $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 \equiv \mathbf{k}$, $|\mathbf{k}| \leq k_F$. Учитывая это обстоятельство и соотношения (1) и (2), легко находим

$$\overline{n(\mathbf{r})} = \langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle = N/V.$$

Соответственно среднее число частиц в объеме v равно $\overline{N(v)} = Nv/V$.

10.38. Оператор плотности числа частиц с определенной проекцией спина на ось z в точке \mathbf{r} имеет вид ($\sigma \equiv s_z$)

$$\hat{n}(\mathbf{r}, \sigma) = \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma}.$$

Соответственно оператор величины $\hat{n}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \hat{n}(\mathbf{r}_2, \sigma_2)$ имеет вид (см. 10.34)

$$\begin{aligned} \hat{n}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \hat{n}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) &= \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}_1 + i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_3 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4 \sigma_2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Рассмотрим матричный элемент

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_3 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4 \sigma_2} | \Psi_0 \rangle, \quad (2)$$

где $|\Psi_0\rangle$ — в. ф. основного состояния ферми-газа, описанная в предыдущей задаче. Легко сообразить, что в случае $\sigma_1 \neq \sigma_2$ величина (2) отлична от нуля (и равна при этом 1) лишь при выполнении условий $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$, $|\mathbf{k}_1| \leq k_F$; $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_4$, $|\mathbf{k}_3| \leq k_F$. Учитывая это обстоятельство, находим ($\sigma_1 \neq \sigma_2$)

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \hat{n}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) | \Psi_0 \rangle &= \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{|\mathbf{k}_1| \leq k_F \\ |\mathbf{k}_3| \leq k_F}} 1 = \frac{1}{V^2} \int_{|\mathbf{k}_1| \leq k_F} \frac{V d^3 k_1}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}_3| \leq k_F} \frac{V d^3 k_3}{(2\pi)^3} = \\ &= \frac{N^2}{(2s+1)^2 V^2} = \frac{\bar{n}^2}{(2s+1)^2} \end{aligned} \quad (3)$$

(сравнить с предыдущей задачей); так как $\overline{n(\mathbf{r}, \sigma)} = \bar{n}/(2s+1)$, то результат (3) означает, что $\overline{n(\mathbf{r}_1, \sigma_1) n(\mathbf{r}_2, \sigma_2)} = \overline{n(\mathbf{r}_1, \sigma_1)} \overline{n(\mathbf{r}_2, \sigma_2)}$, т. е. в случае $\sigma_1 \neq \sigma_2$ между плотностями числа частиц в различных точках нет корреляции.

В случае же $\sigma_1 = \sigma_2$ ситуация иная. Матричный элемент (2) отличен от нуля (и равен при этом 1) только в следующих случаях:

- а) $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2, |\mathbf{k}_2| \leq k_F; \quad \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_4, |\mathbf{k}_4| \leq k_F;$
 б) $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_4, |\mathbf{k}_4| \leq k_F; \quad \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3, |\mathbf{k}_3| > k_F.$

Учитывая это, находим

$$\overline{n(\mathbf{r}_1, \sigma) n(\mathbf{r}_2, \sigma)} = \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{|\mathbf{k}_1| \leq k_F \\ |\mathbf{k}_3| \leq k_F}} 1 + \frac{1}{V^2} \sum_{|\mathbf{k}_1| \leq k_F} \sum_{|\mathbf{k}_2| > k_F} e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) + i\mathbf{k}_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}. \quad (4)$$

Воспользовавшись соотношением

$$\frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{1}{V} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right\} = \delta(\mathbf{r}) - \frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (5)$$

(в (5) использовано условие полноты системы функций $\Psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$) и вычислив интеграл

$$\sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k \leq k_F} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{r^2} \left\{ \frac{\sin k_F r}{r} - k_F \cos k_F r \right\}$$

(он вычисляется элементарно в сферических координатах с полярной осью, направленной вдоль \mathbf{r}), приводим выражение (4) к виду ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \overline{n(\sigma)} = \bar{n}/(2s+1)$)

$$\overline{n(\mathbf{r}_1, \sigma) n(\mathbf{r}_2, \sigma)} = \overline{n(\sigma)}^2 - \frac{1}{4\pi^4 r^4} \left\{ \frac{\sin k_F r}{r} - k_F \cos k_F r \right\}^2. \quad (6)$$

С помощью (6) находим соответствующую корреляционную функцию:

$$\nu(r, \sigma) = \frac{1}{\overline{n(\sigma)}} \left\{ \overline{n(\mathbf{r}_1, \sigma) n(\mathbf{r}_2, \sigma)} - \overline{n(\sigma)}^2 \right\} = - \frac{[\sin k_F r - k_F r \cos k_F r]^2}{4\pi^4 r^6 \overline{n(\sigma)}}.$$

Отметим, что при $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$ эта функция обращается в нуль, т. е. корреляция исчезает — естественный результат.

Характер установленных корреляций весьма нагляден. Тождественные частицы с различными проекциями спина ведут себя как различные частицы, и установленное выше отсутствие корреляций в этом случае — вполне естественно (сравнить со

случае классических частиц, обсуждавшимся в 10.36). В случае одинаковых проекций спина корреляционная функция $v(r, \sigma) < 0$ — также естественный результат, отражающий «отталкивательный» характер обменного взаимодействия для фермионов (сравнить с результатом задачи 10.10).

Легко заметить, что корреляционная функция $v(r)$ плотности числа частиц вообще (безразлично, с какой проекцией спина) совпадает с $v(r, \sigma)$.

10.39. Оператор взаимодействия между частицами в представлении чисел заполнения имеет вид

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) d^3r_1 d^3r_2. \quad (1)$$

Используя разложение $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ -оператора по плоским волнам (см., например, 10.35), можно преобразовать (1) к виду

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} U_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}, \quad (2)$$

где

$$U_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2} \int \int U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}_1 + i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}_2} d^3r_1 d^3r_2. \quad (3)$$

Рассматривая взаимодействие между частицами как возмущение и учитывая значение $E_0^{(0)} = 0$ энергии основного состояния в отсутствие возмущения, находим по известной формуле теории возмущений

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \langle \Psi_0 | \hat{U} | \Psi_0 \rangle, \quad (4)$$

где $|\Psi_0\rangle$ — в. ф. основного состояния системы невзаимодействующих частиц. Так как в состоянии $|\Psi_0\rangle$ все частицы имеют импульс $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} = 0$, то матричный элемент

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1} | \Psi_0 \rangle,$$

очевидно, отличен от нуля лишь в случае, когда все $\mathbf{k}_a = 0$, и равен при этом $N(N-1) \approx N^2$ ($N \gg 1$). Учитывая это обстоятельство, согласно (2) и (4) легко находим

$$E_0 \approx \frac{1}{2} U_{00}^{00} N^2.$$

Так как радиус R потенциала $U(r)$ предполагается, естественно, имеющим микроскопические размеры, так что $R \ll L \sim V^{1/3}$, то при вычислении интеграла

$$\int_V U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d^3r_2 \approx \int \int_{-\infty}^{\infty} U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) d^3r_2 = \int U(r) d^3r$$

можно интегрировать по всему пространству, и он оказывается не зависящим от \mathbf{r}_1 . Учитывая это, находим из (3)

$$U_{00}^{00} = \frac{1}{V^2} \int_V \int_V U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 = \frac{1}{V} \int U(r) d^3r,$$

и окончательное выражение для E_0 принимает вид

$$E_0 \approx \frac{1}{2} \frac{\tilde{U}(0) N^2}{V} \quad (\tilde{U}(0) = \int U(r) d^3r). \quad (5)$$

Укажем, что более полное исследование рассматриваемой задачи содержится в книге [6].

10.40. Задача решается аналогично предыдущей. Оператор взаимодействия частиц друг с другом имеет вид ($\sigma = s_z$)

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \\ \sigma_1, \sigma_2}} U_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_2, \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4, \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_3, \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}, \quad (1)$$

где

$$U_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2} \int_V \int_V U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}_1 + i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}_2} d^3r_1 d^3r_2. \quad (2)$$

Поправка первого порядка к энергии $E_0^{(0)}$ основного состояния ферми-газа невзаимодействующих частиц, связанная с взаимодействием частиц друг с другом, имеет вид

$$E_0^{(1)} = \langle \Psi_0 | \hat{U} | \Psi_0 \rangle, \quad (3)$$

где $|\Psi_0\rangle$ — в. ф. основного состояния системы невзаимодействующих фермионов.

Учитывая известные значения чисел заполнения одночастичных состояний в основном состоянии идеального ферми-газа: $n_{\mathbf{k}\sigma} = 1$ для $|\mathbf{k}| \leq k_F$ и $n_{\mathbf{k}\sigma} = 0$ для $|\mathbf{k}| > k_F$, — замечаем, что при подстановке в (3) явного вида (1) оператора \hat{U} все слагаемые сумм по \mathbf{k}_a , для которых хотя бы одно из $|\mathbf{k}_a|$ больше k_F , равны нулю. Соответственно в выражение (3) входят величины $U_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}$, для которых $|\mathbf{k}_a| \leq k_F$. Перейдя в формуле (2) к новым переменным $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, запишем ее в виде

$$U_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2} \int_V U(r) e^{\frac{i}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}} d^3r \int_V e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{R}} d^3R. \quad (4)$$

Учитывая микроскопичность размера R_0 радиуса потенциала $U(r)$, так что $R_0 \ll L \sim V^{1/3}$, интегрирование в этом выражении по \mathbf{r} можно выполнить по всему пространству (сравнить с 10.39); а так как $k_F R_0 \ll 1$, то в интересующем нас случае в интеграле по \mathbf{r} можно заменить экспоненциальный сомножитель единицей, и выражение (4) оказывается равным

$$U_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \approx \frac{1}{V} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \int U(r) d^3r$$

(множитель $\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}$ отвечает сохранению импульса в процессе столкновения частиц в газе).

Учитывая сказанное выше, легко заметить, что выражение (3) принимает вид

$$E_0^{(1)} = \frac{\tilde{U}(0)}{2V} \langle \Psi_0 | \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \\ \sigma_1 \sigma_2}} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_3 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_4 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} | \Psi_0 \rangle, \quad (5)$$

$$\tilde{U}(0) = \int U(r) d^3r.$$

Нетрудно сообразить, основываясь на явном виде в. ф. $|\Psi_0\rangle$, что из всех слагаемых сумм по \mathbf{k}_a , входящих в (5), отличны от нуля, вообще говоря, лишь такие, для которых либо $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_2$, либо $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_2$, так что (5) можно записать в виде

$$E_0^{(1)} = \frac{\tilde{U}(0)}{2V} \langle \Psi_0 | \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \sigma_1 \sigma_2} (\hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} + \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}) | \Psi_0 \rangle. \quad (6)$$

Далее замечаем, что «двойная» сумма по $\mathbf{k}_{1,2}$ в (6) при $\sigma_1 = \sigma_2$ равна нулю (так как равны нулю ее слагаемые: $\hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma} + \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma} = [\hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma}^+, \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma}^+]_+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma} = 0$), так что фактически в (6) $\sigma_1 \neq \sigma_2$. При этом, используя антикоммутиционные свойства фермиевских операторов \hat{a} , \hat{a}^+ , первую часть суммы в (6) можно записать в виде

$$\sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \\ \sigma_1 \neq \sigma_2}} \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} = \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \\ \sigma_1 \neq \sigma_2}} \hat{n}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \hat{n}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1},$$

где $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$ — операторы чисел заполнения. Так как $\hat{N}(\sigma) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$ — оператор числа частиц в спиновом состоянии σ , а в основном состоянии $|\Psi_0\rangle$ эти числа имеют определенные значения $N(\sigma = 1/2) = N(\sigma = -1/2) = N/2$, то

$$\langle \Psi_0 | \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \\ \sigma_1 \neq \sigma_2}} \hat{n}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \hat{n}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} | \Psi_0 \rangle = \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2} \langle \Psi_0 | \hat{N}(\sigma_2) \hat{N}(\sigma_1) | \Psi_0 \rangle = 2 \left(\frac{N}{2} \right)^2 = \frac{N^2}{2}. \quad (7)$$

При $\sigma_1 \neq \sigma_2$ слагаемые во второй части суммы в (6) отличны от нуля лишь при $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$, и она оказывается равной

$$\langle \Psi_0 | \sum_{\mathbf{k}, \sigma_1 \neq \sigma_2} \hat{n}_{\mathbf{k} \sigma_2} \hat{n}_{\mathbf{k} \sigma_1} | \Psi_0 \rangle = 2 \frac{N}{2} = N,$$

т. е. пренебрежимо малой (в силу $N \gg 1$) по сравнению с (7). Таким образом, $E_0^{(1)} = \frac{\tilde{U}(0) N^2}{4V}$ и энергия основного состояния

с учетом взаимодействия частиц принимает вид

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \frac{3}{10} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m} N + \frac{\tilde{U}(0) N^2}{4V}$$

($E_0^{(0)}$ — энергия основного состояния идеального ферми-газа).

Более полное исследование рассматриваемой задачи содержится в книге [6].

10.41. Энергия частицы, имеющей импульс \mathbf{p} и проекцию s_z спина на ось z , направленную вдоль магнитного поля, равна

$$\epsilon_{\mathbf{p}s_z} = \frac{p^2}{2m} - 2\mu_0 \mathcal{H} s_z.$$

Обозначим через N_{\pm} числа частиц в основном состоянии ферми-газа, имеющих соответственно $s_z = \pm 1/2$. Так как в основном состоянии энергия имеет минимальное значение, то ему соответствуют следующие числа заполнения: $n_{\mathbf{p}, \pm} = 1$ для $|\mathbf{p}| \leq p_{F, \pm}$ и $n_{\mathbf{p}, \pm} = 0$ для $|\mathbf{p}| > p_{F, \pm}$, где $p_{F, \pm}$ связаны соотношением

$$\frac{p_{F,+}^2}{2m} - \mu_0 \mathcal{H} = \frac{p_{F,-}^2}{2m} + \mu_0 \mathcal{H}, \quad (1)$$

означающим равенство максимальных энергий заполненных состояний с $s_z = \pm 1/2$ и обеспечивающим минимальность энергии всей системы (сравнить со случаем «свободного» идеального ферми-газа).

Выражая обычным образом $p_{F, \pm}$ через N_{\pm} :

$$N_{\pm} = \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}, \pm} = \int_{|\mathbf{p}| \leq p_{F, \pm}} \frac{V d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V p_{F, \pm}^3}{6\pi^2 \hbar^3}, \quad p_{F, \pm} = \left(\frac{6\pi^2 \hbar^3 N_{\pm}}{V} \right)^{1/3},$$

находим с помощью (1) уравнение для определения N_{\pm} :

$$(N_+)^{2/3} - (N_-)^{2/3} = 4m\mu_0 \mathcal{H} \left(\frac{V}{6\pi^2 \hbar^3} \right)^{2/3}, \quad N_+ + N_- = N, \quad (2)$$

через которые очевидным образом выражается магнитный момент газа:

$$\mathfrak{M}_z = \mu_0 N_+ - \mu_0 N_- = \mu_0 (N_+ - N_-), \quad \mathfrak{M}_x = \mathfrak{M}_y = 0. \quad (3)$$

При $\mathcal{H} = 0$ из (2) следует $N_+ = N_- = N/2$. Соответственно в случае достаточно слабого поля (см. ниже) значения N_{\pm} мало отличаются от $N/2$. Представив их в виде $N_{\pm} = N/2 \pm n$ и выполнив в получающемся из (2) после такой подстановки выражении разложение по малому параметру (n/N) ($(N/2 \pm n)^{2/3} \approx (N/2)^{2/3} (1 \pm 4n/3N)$), легко находим

$$n = \frac{N_+ - N_-}{2} = \frac{3}{2} m\mu_0 \mathcal{H} N \left(\frac{V}{3\pi^2 \hbar^3 N} \right)^{2/3} \quad (4)$$

(при этом условии $n \ll N$ накладывает ограничение на величину поля \mathcal{H} , при которой его можно считать слабым).

Согласно (3) и (4) имеем в случае слабого поля

$$\mathfrak{M} = 3m\mu_0^2 N \left(\frac{V}{3\pi^2 \hbar^3 N} \right)^{2/3} \mathcal{H}, \quad (5)$$

и магнитная восприимчивость оказывается равной

$$\chi = \frac{3m\mu_0^2}{(3\pi^2 \hbar^3)^{2/3}} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

(напомним, что χ определяется как коэффициент пропорциональности при \mathcal{H} в выражении для магнитного момента \mathbf{M} единицы объема вещества, т. е. $\mathbf{M} = \mathfrak{M}/V = \chi \mathcal{H}$).

Так как $\chi > 0$, то рассматриваемый ферми-газ является парамагнетиком (в противоположность диамагнетикам, для которых $\chi < 0$).

С увеличением поля, как легко увидеть из (2), значение $|N_+ - N_-|$ монотонно возрастает и при $\mathcal{H} \geq \mathcal{H}_{кр}$, где

$$\mathcal{H}_{кр} = \frac{1}{4m|\mu_0|} \left(\frac{6\pi^2 \hbar^3 N}{V} \right)^{2/3},$$

становится равным N , т. е. спины всех частиц выстраиваются в одном направлении (по или против направления \mathcal{H} в зависимости от знака μ_0). При этом магнитные моменты всех частиц ориентируются вдоль поля (происходит, как говорят, насыщение).

Глава 11

АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ

11.1. Релятивистская поправка к функции Гамильтона заряженной частицы в электростатическом поле в классической теории согласно формуле ($-e$ — заряд частицы, $p \ll mc$)

$$\mathcal{H} = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - e\varphi(\mathbf{r}) - mc^2 \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} - e\varphi(\mathbf{r})$$

равна $-p^4/8m^3 c^2$. Квантовомеханическим обобщением этой поправки является дополнительное слагаемое $H' = -\hat{p}^4/8m^3 c^2$ *), рассматриваемое как оператор возмущения гамильтониана. Так как оператор H' коммутирует с операторами l^2 и l_z , то с. ф. $\Psi_{n,l,m}^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана являются правильными функциями нулевого приближения при наличии возмущения, так что поправка первого порядка к уровням энергии определяется мат-

*) Сравнить с результатом задачи 15.15.

ричным элементом ($-e\varphi = -Ze^2/r$):

$$\begin{aligned} E_{n,r,l}^{(1)} &= \int \Psi_{n,r,l,m}^{(0)*} \hat{H}' \Psi_{n,r,l,m}^{(0)} dV = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \langle n,r,l,m | \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{4m^2} | n,r,l,m \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle n,r,l,m | \left(\hat{H}_0 + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 | n,r,l,m \rangle = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \langle n,r,l,m | \hat{H}_0^2 + \hat{H}_0 \frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2}{r} \hat{H}_0 + \left(\frac{Ze^2}{r} \right)^2 | n,r,l,m \rangle \quad (1) \end{aligned}$$

(H_0 — невозмущенный гамильтониан водородоподобного атома).
Учитывая соотношения ($n = n_r + l + 1$)

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 | n,r,l,m \rangle &= E_n^{(0)} | n,r,l,m \rangle, \quad \langle n,r,l,m | \hat{H}_0 = E_n^{(0)} \langle n,r,l,m |, \quad E_n^{(0)} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2}, \\ \langle n,r,l,m | \frac{Ze^2}{r} | n,r,l,m \rangle &= -2E_n^{(0)}, \quad \langle n,r,l,m | \frac{1}{r^2} | n,r,l,m \rangle = -\frac{4mE_n^{(0)}}{(2l+1)\hbar^2 n} \quad (2) \end{aligned}$$

(первое из соотношений (2) следует из теоремы вириала, второе легко получить на основании 1.28 дифференцированием по параметру l оператора

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (3)$$

с. з. которого $E_{n,r,l} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2(n_r+l+1)^2}$ при целочисленных значениях l определяют спектр энергии водородоподобного атома; кстати, точно так же дифференцированием по параметру Ze^2 можно получить простое доказательство теоремы вириала в случае кулоновского поля), выражение (1) легко преобразовать к виду

$$E_{n,r,l}^{(1)} = \left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 \left\{ -\frac{3}{4n^2} + \frac{2}{(2l+1)n} \right\} E_n^{(0)}. \quad (4)$$

Как видно из полученного выражения, учет релятивистской поправки полностью снимает случайное вырождение уровней в кулоновском поле (напомним, что проведенное рассмотрение относится лишь к бесспиновым частицам): уровень с данным n расщепляется на n компонент ($l = 0, 1, \dots, n-1$).

Ширина интервала тонкой структуры (разность энергий крайних компонент, отвечающих значениям $l = 0$ и $l_{\max} = n-1$), для уровня с данным значением n согласно (4) равна

$$\Delta E_{FS} = 4 \left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{n-1}{n(2n-1)} |E_n^{(0)}|. \quad (5)$$

Так, для $n = 2$ получаем $\Delta E_{FS} \approx 1,21 \cdot 10^{-4} Z^4$ эВ *).

*) Отметим, что при учете спина электрона тонкая структура водородоподобного атома с точечным ядром согласно уравнению Дирака имеет следующую характерную особенность. Уровень с данным главным квантовым

Согласно (4) имеем для нижних уровней ($n \sim 1$) оценку

$$|E_{n,l}^{(1)}/E_n^{(0)}| \sim \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 \approx \frac{Z^2}{(137)^2} \sim 10^{-4} Z^2,$$

так что в случае $Z \sim 100$ электрон в атоме уже нельзя считать нерелятивистским (это — естественный результат, так как характерная скорость электрона в водородоподобном атоме равна $v \sim Ze^2/\hbar = Z \frac{e^2}{\hbar c} c \approx \frac{Z}{137} c$).

11.2. Потенциальная энергия $U(r) = -e\phi(r)$ в у. Ш. с учетом известного выражения для потенциала $\phi(r)$ равномерно заряженного шара (заряд шара Ze , радиус R) равна

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r}, & r > R, \\ -\frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right), & r < R. \end{cases} \quad (1)$$

Представив гамильтониан в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$, где

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{r}$$

— гамильтониан водородоподобного атома, рассматриваем V как возмущение. Очевидно,

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r > R, \\ \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right), & r < R. \end{cases}$$

С. ф. гамильтониана \hat{H}_0 хорошо известны. В частности, в. ф. основного состояния имеет вид ($a_0 = \hbar^2/m_e e^2 \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ см)

$$\Psi_0(r) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-Zr/a_0}, \quad E_0^{(0)} = -\frac{m_e (Ze^2)^2}{2\hbar^2}.$$

числом n , имеющий согласно нерелятивистской теории кратность вырождения $2n^2$ (2 — из-за спина электрона), при учете релятивистских поправок расщепляется (как и в случае бесспиновой частицы) на n компонент, каждая из которых отвечает определенному значению j полного момента электрона ($j = 1/2, 3/2, \dots, n - 1/2$). При этом случайное вырождение снимается не полностью, так как остаются вырожденными уровни с одинаковым значением j , но различными $l = j \pm 1/2$. Так, для $n = 2$ уровень расщепляется на две компоненты, одна из которых представляет $2p_{3/2}$ -состояния, а другая — (вырожденные) $2p_{1/2}$ - и $2s_{1/2}$ -состояния; при этом интервал тонкой структуры равен $\Delta E_{FS} \approx 4,5 \cdot 10^{-5} Z^2$ эВ.

Сдвиг энергетического уровня основного состояния за счет неточности ядра (т. е. под действием возмущения $V(r)$) равен

$$\begin{aligned}\Delta E_0 = E_0^{(1)} &= \int V(r) |\Psi_0(r)|^2 d^3r = \\ &= Ze^2 |\Psi_0(0)|^2 \int_0^R \left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2R} + \frac{r^2}{2R^3} \right) 4\pi r^2 dr = \\ &= \frac{2\pi}{5} Ze^2 R^2 |\Psi_0(0)|^2 = \frac{2}{5} Z^4 \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 \frac{e^2}{a_0}\end{aligned}$$

(при вычислении интеграла мы учли, что в. ф. $\Psi_0(r)$ в области ядра $r \leq R \sim (10^{-12} - 10^{-13})$ см остается почти постоянной, и поэтому вынесли величину $|\Psi_0(r)|^2 \approx |\Psi_0(0)|^2$ за знак интеграла).

Численное значение отношения

$$|E_0^{(1)}/E_0^{(0)}| = \frac{4}{5} Z^2 \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 \approx 8 \cdot 10^{-10} Z^{8/3} \quad (2)$$

($R \approx 1,5 Z^{1/3} \cdot 10^{-13}$ см, см. следующую задачу) при $Z = 1$ является величиной порядка 10^{-9} , что существенно меньше аналогичного отношения для релятивистской поправки: $\sim 10^{-4}$ (см. предыдущую задачу).

В случае μ -мезоатомов эффект неточности ядра проявляется более сильно. Оценка типа (2) с учетом значения $m_\mu \approx 207m_e$ дает, очевидно, $|E_0^{(1)}/E_0^{(0)}| \approx 3 \cdot 10^{-5} Z^{8/3} \approx 0,2$ (для $Z = 27$), т. е. при больших значениях Z неточность ядра существенно влияет на спектр μ -мезоатома (см. следующую задачу).

11.3. Энергетические уровни и соответствующие им в. ф. определяются из решения у. Ш. с потенциальной энергией $U(r)$, приведенной в предыдущей задаче. Решение у. Ш. для произвольного R оказывается довольно громоздким. Однако предельные случаи допускают простое приближенное решение.

В случае достаточно малых значений Z неточность ядра является несущественной и уровни энергии и в. ф. имеют обычный, хорошо известный водородоподобный вид (с заменой электронной массы на мюонную). Ядро можно рассматривать как точечное, если величина $R = 1,2A^{1/3} \cdot 10^{-13}$ см $\approx 1,5Z^{1/3} \cdot 10^{-13}$ см много меньше радиуса $a_0 = \hbar^2/\mu Ze^2$ первой борвской орбиты мезона массы $\mu \approx 207m_e$ в поле точечного ядра с зарядом Ze ; условие $R \ll a_0$ дает $Z \ll 45$.

В противоположном случае больших R (или Z , см. ниже) в. ф. нижних уровней локализованы в области внутри ядра и уровни энергии и в. ф. определяются потенциальной энергией мезона внутри ядра, имеющей осцилляторный вид $U(r) = -\frac{3Ze^2}{2R} + \frac{Ze^2}{2R^3} r^2$. Энергетический спектр и в. ф. стационарных состояний легко получить на основании результата задачи 4.25 (см. также

4.5). Так, уровни энергии мезона определяются выражением

$$E_N = -3Ze^2/2R + \hbar\omega_0(N + 3/2); \quad N = 0, 1, \dots, \quad \omega_0 = \sqrt{Ze^2/\mu R^3}. \quad (1)$$

В.ф., относящиеся к уровню (1), локализованы на расстоянии порядка a , определяемом из условия

$$(Ze^2/2R^3)a^2 = \hbar\omega_0(N + 3/2), \quad \text{т. е. } a = \sqrt{(2N + 3)^2 \hbar^2 R^3 / Ze^2 \mu}.$$

Неравенство $R \gg a$, или $Z \gg 250$ (для $N = 0$), представляет условие применимости проведенного рассмотрения.

Отметим, что величина ω_0 в формуле (1) не зависит от Z (так как $R \propto Z^{1/3}$); при этом $\hbar\omega_0 \approx 12$ МэВ, что оправдывает применимость нерелятивистского рассмотрения.

Для реальных ядер черты рассматриваемого предельного случая $Z \gg 250$ начинают проявляться, да и то лишь в грубом приближении, только для самых тяжелых ядер с $Z = 80-100$. Численное решение задачи дает для таких ядер характерное расстояние между нижними уровнями $2p$ - и $1s$ -состояний около 6 МэВ (сравнить с $\hbar\omega_0 = 12$ МэВ и с $\hbar\omega_0 \approx 20$ МэВ для *точечного* ядра урана), при этом мезон в основном состоянии находится внутри ядра с вероятностью приблизительно 0,5.

11.4. Согласно классической электродинамике взаимодействие электрона (заряженной частицы, имеющей собственный магнитный момент) с магнитным полем ядра (магнитного диполя) определяется выражением

$$V = -\mu_{\text{эл}} \mathcal{H}_{\text{яд}}(r), \quad (1)$$

где

$$\mu_{\text{эл}} = \mu_{\text{орб}} + \mu_{\text{соб}} = -\frac{e\mathbf{L}}{2mc} + \mu_{\text{соб}},$$

$$\mathcal{H}_{\text{яд}} = \text{rot } \mathbf{A} = \text{rot } \frac{[\mu_{\text{яд}} \boldsymbol{\Gamma}]}{r^3} \equiv \{(\mu_{\text{яд}} \nabla) \nabla - \mu_{\text{яд}} \Delta\} \frac{1}{r}.$$

Квантовомеханическим обобщением выражения (1) является оператор взаимодействия \hat{V} , получаемый заменой классических величин на соответствующие операторы:

$$\mathbf{L} \rightarrow \hbar \hat{\mathbf{l}}, \quad \mu_{\text{соб}} \rightarrow 2\mu_e \hat{\mathbf{s}} = -\frac{e\hbar}{mc} \hat{\mathbf{s}}, \quad \mu_{\text{яд}} \rightarrow \frac{\mu_0 \hat{\mathbf{l}}}{I}.$$

Оператор \hat{V} легко преобразовать к виду (\hat{V} — эрмитов оператор)

$$\hat{V} = \frac{e\hbar\mu_0}{2mcI} \hat{l}_i (\hat{l}_k + 2\hat{s}_k) \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \delta_{ik} \Delta \right) \frac{1}{r}.$$

Усредним оператор \hat{V} по в.ф. $\Psi_0(r)$ пространственного движения электрона в основном, $1s$ -состоянии. Возникающий при

усреднении интеграл можно, очевидно, представить как *)

$$\int |\Psi_0(r)|^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \delta_{ik} \Delta \right) \frac{1}{r} dV = C \delta_{ik}.$$

Для определения величины C в этом соотношении произведем свертку по индексам i и k (т. е. положим $i = k$ и просуммируем по i); с учетом равенств $\delta_{ii} = 3$ и $\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{r} = \Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r)$ находим $C = \frac{8\pi}{3} |\Psi_0(0)|^2$. В результате указанного усреднения получаем

$$\bar{V} = \frac{8\pi e \hbar \mu_0}{3mcI} |\Psi_0(0)|^2 (\hat{\mathbf{I}} \hat{\mathbf{s}}) \quad \left(|\Psi_0(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} = \frac{Z^3 m^3 e^6}{\pi \hbar^6} \right);$$

\bar{V} все еще является оператором в пространстве спиновых переменных электрона и ядра.

С.з. оператора \bar{V} определяют энергетические сдвиги основного уровня за счет рассматриваемого взаимодействия:

$$E_{\text{HFS}} = \frac{4\pi e \hbar \mu_0}{3mcI} |\Psi_0(0)|^2 \cdot \begin{cases} I, & J = I + 1/2, \\ -(I + 1), & J = I - 1/2 \end{cases}$$

(J — полный момент системы «ядро + электрон», см. 3.34), т. е. уровень расщепляется на два в соответствии с возможными значениями $J = I \pm 1/2$ полного момента. Величина сверхтонкого расщепления равна

$$\Delta E_{\text{HFS}} = E_{\text{HFS}}(J = I + 1/2) - E_{\text{HFS}}(J = I - 1/2) = \frac{4\pi e \hbar \mu_0 (2I + 1) |\Psi_0(0)|^2}{3mcI}. \quad (2)$$

Для атома водорода находим численное значение величины (2): $\Delta v_{\text{HFS}} \equiv \Delta E_{\text{HFS}} / 2\pi \hbar \approx 1420$ МГц в согласии с экспериментальным значением.

Сравнение величины (2) с интервалом тонкой структуры при $n \sim 1$ (см. 11.1) дает $|\Delta E_{\text{HFS}} / \Delta E_{\text{FS}}| \sim \frac{m}{m_p} \sim 10^{-3}$, т. е. сверхтонкое расщепление значительно меньше тонкой структуры.

11.5. В пренебрежении взаимодействием между электронами $V = 1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ (мы используем атомную систему единиц) в. ф.

*) Фактически

$$\hat{V} \propto \int \Psi_0^*(r) (\hat{l}_k + 2\hat{s}_k) \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} - \delta_{ik} \Delta \right) \frac{1}{r} \right] \Psi_0(r) d^3r.$$

Однако интеграл, содержащий оператор \hat{l}_k , равен нулю, что следует из условия $\hat{l}_k \Psi_0^*(r) = 0$ и эрмитовости \hat{l}_k (позволяющей «перенести» его действие на функцию $\Psi_0^*(r)$).

основного состояния гелиеподобного иона имеет вид $\Psi = \Psi_0(r_1)\Psi_0(r_2) = \frac{Z^3}{\pi} e^{-Z(r_1+r_2)}$. Она отвечает энергетическому уровню $E_0^{(0)} = -Z^2$. Поправка первого порядка к энергии уровня равна

$$E_0^{(1)} = \int \frac{|\Psi|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 = \frac{Z^6}{\pi^2} \int e^{-2Z(r_1+r_2)} \frac{r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 d\Omega_1 d\Omega_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}}. \quad (1)$$

Интегралы вида

$$\int f(r_1) g(r_2) \frac{dr_1 dr_2 d\Omega_1 d\Omega_2 r_1^2 r_2^2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} \quad (2)$$

удобно вычислять следующим образом: при фиксированном \mathbf{r}_1 интегрируем по угловым переменным \mathbf{r}_2 , выбрав направление вектора \mathbf{r}_1 за полярную ось; при этом

$$\int \frac{d\Omega_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int \frac{\sin \theta d\theta d\varphi}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} = \begin{cases} 4\pi/r_1, & r_1 > r_2, \\ 4\pi/r_2, & r_2 > r_1, \end{cases}$$

и выражение (2) принимает вид

$$16\pi^2 \left\{ \int_0^\infty f(r_1) r_1 \int_0^{r_1} g(r_2) r_2^2 dr_2 dr_1 + \int_0^\infty g(r_2) r_2 \int_0^{r_2} f(r_1) r_1^2 dr_1 dr_2 \right\}.$$

Учитывая сказанное, довольно просто находим

$$\int \frac{e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 = 16\pi^2 \frac{2\alpha^2 + 2\beta^2 + 6\alpha\beta}{\alpha^2 \beta^2 (\alpha + \beta)^3}. \quad (3)$$

Энергия основного состояния в первом порядке теории возмущений равна

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -Z^2 + 5Z/8, \quad (4)$$

и потенциал ионизации, представляющий разность энергий основного состояния водородоподобного иона $-Z^2/2$ и рассматриваемого гелиеподобного иона E_0 (4), определяется выражением

$$I = (Z^2/2 - 5Z/8) \text{ ат. ед.}$$

Численные значения I для некоторых ионов представлены в таблице (напомним, что 1 ат. ед. энергии $\approx 27,2$ эВ).

	Потенциалы ионизации I в эВ двухэлектронных систем			
	He	Li ⁺	Be ⁺⁺	C ⁴⁺
Согласно задаче 11.5	20,4	71,4	150	388
Согласно задаче 11.7	23,1	74,0	152	391
Эксперим. значение	24,5	75,6	153,6	393

11.6. В. ф. основного состояния системы с гамильтонианом \hat{H}_0 имеет вид $\Psi_0 = \frac{Z_{\text{эфф}}^3}{\pi} \exp[-Z_{\text{эфф}}(r_1 + r_2)]$ и отвечает энергии $E_0^{(0)} = -Z_{\text{эфф}}^2$. Возмущение \hat{V} , очевидно, равно

$$V = \frac{1}{|r_1 - r_2|} - (Z - Z_{\text{эфф}}) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right).$$

С учетом значений интегралов

$$\int \frac{1}{r} e^{-2\alpha r} dV = \frac{\pi}{\alpha^2}, \quad \int e^{-2\alpha(r_1+r_2)} \frac{dV_1 dV_2}{|r_1 - r_2|} = \frac{5\pi^2}{8\alpha^5}$$

(вычисление второго из них обсуждалось в предыдущей задаче) легко находим поправку первого порядка к уровню энергии:

$$E_0^{(1)} = Z_{\text{эфф}}(2Z_{\text{эфф}} - 2Z + 5/8).$$

Выбрав $Z_{\text{эфф}}$ из условия $E_0^{(1)} = 0$, т. е. $Z_{\text{эфф}} = Z - 5/16$, находим энергию основного состояния двухэлектронного иона в виде

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -(Z - 5/16)^2 \quad (1)$$

(сравнить значение (1) с результатами предыдущей и последующей задач).

11.7. Среднее значение гамильтониана гелиеподобного иона

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|}$$

в состоянии, описываемом в. ф. вида $\Psi = \frac{1}{\pi} Z_{\text{эфф}}^3 \exp[-Z_{\text{эфф}} \times (r_1 + r_2)]$, легко найти, если учесть соотношение

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{\alpha}{r}\right)e^{-\alpha r} = -\frac{\alpha^2}{2}e^{-\alpha r},$$

записать гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \left(-\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r_1}\right) + \left(-\frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r_2}\right) - (Z - Z_{\text{эфф}}) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{|r_1 - r_2|}$$

и воспользоваться значениями интегралов, приведенных в предыдущей задаче:

$$\bar{E}(Z_{\text{эфф}}) = Z_{\text{эфф}}(Z_{\text{эфф}} - 2Z + 5/8).$$

Минимизируя это выражение по $Z_{\text{эфф}}$, находим приближенное значение энергии основного состояния гелиеподобного иона

$$E_0 \approx \min \bar{E}(Z_{\text{эфф}}) = -(Z - 5/16)^2 \quad (1)$$

и потенциала ионизации системы

$$I = -Z^2/2 - E_0 = Z^2/2 - 5Z/8 + 25/256. \quad (2)$$

Численные значения I для некоторых ионов, рассчитанные по формуле (2), приведены в таблице задачи 11.5.

Для иона H^- (система «протон + два электрона») имеем согласно (1) $E_0 = -0,47$. Это значение выше энергии основного состояния атома водорода, равной $-0,5$. Поэтому на основании данной задачи нельзя сделать вывода о существовании устойчивого иона H^- (по этому вопросу см. следующую задачу).

11.8. Простое, но несколько громоздкое вычисление дает

$$\bar{E}(\alpha, \beta) = 2C^2 \left\{ -Z(\alpha + \beta) + \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} + \frac{\alpha\beta}{(\alpha + \beta)} + \frac{\alpha^2\beta^2}{(\alpha + \beta)^3} + \frac{20\alpha^3\beta^3}{(\alpha + \beta)^5} + 64\alpha^3\beta^3 \frac{\alpha\beta - Z(\alpha + \beta)}{(\alpha + \beta)^6} \right\}, \quad (1)$$

где из условия нормировки в. ф. на единицу

$$2C^2 = \left[1 + \frac{64\alpha^3\beta^3}{(\alpha + \beta)^6} \right]^{-1}.$$

Расчет $\bar{E} = \int \Psi(r_1, r_2) \hat{H} \Psi(r_1, r_2) dV_1 dV_2$ для указанной в. ф. сводится к вычислению простых интегралов (правда, их много и в этом — громоздкость вычислений). Все встречающиеся интегралы сводятся к следующим четырем:

$$\int e^{-\gamma r} dV = 4\pi \int_0^\infty e^{-\gamma r} r^2 dr = 8\pi/\gamma^3,$$

$$\int e^{-\alpha r} \Delta e^{-\beta r} dV = - \int (\nabla e^{-\alpha r}) (\nabla e^{-\beta r}) dV = -\alpha\beta \int e^{-(\alpha+\beta)r} dV = -8\pi\alpha\beta/(\alpha + \beta)^3,$$

$$\int \frac{1}{r} e^{-\gamma r} dV = 4\pi \int_0^\infty e^{-\gamma r} r dr = 4\pi/\gamma^2,$$

$$\int e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} \frac{dV_1 dV_2}{|r_1 - r_2|} = 16\pi^2 \left\{ \frac{2(\alpha^2 + \beta^2)}{\alpha^2\beta^2(\alpha + \beta)^3} + \frac{6}{\alpha\beta(\alpha + \beta)^3} \right\}$$

(по поводу вычисления последнего интеграла см. 11.5).

Выражение (1) может быть использовано для более точного по сравнению с предыдущей задачей расчета энергии основного состояния гелиеподобного иона вариационным методом.

Для иона H^- ($Z = 1$) значение (1) величины \bar{E} при $\alpha = 1$, $\beta = 1/4$ равно $\bar{E} = -0,512$, что ниже энергии основного состояния атома водорода, равной $-0,50$, и тем самым доказывает существование устойчивого иона H^- . Экспериментальное значение

энергии этого иона равно $E_0 = -0,527$ ат. ед. (ниже вариационного значения \bar{E} , как и следовало ожидать).

11.9. Боровский радиус водородоподобного мезоатома в $m_\mu/m_e \approx 207$ раз меньше радиуса электронного атома, так что для электрона наличие в атоме мюона сводится к экранированию заряда ядра на единицу. Поэтому представляется очевидным следующий выбор невозмущенного гамильтониана рассматриваемой системы:

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_\mu} \Delta_\mu + \Delta_e \right) - \frac{Z}{r_\mu} - \frac{(Z-1)}{r_e} \quad (1)$$

(при написании (1) мы считали ядро бесконечно тяжелым; конечность массы ядра можно приближенно учесть, заменив в (1) массу мюона соответствующей приведенной массой $\mu = m_\mu M / (m_\mu + M)$, M — масса ядра, в этом приближении центр масс рассматриваемой системы совпадает с центром масс системы «ядро + мюон»).

С. з. гамильтониана \hat{H}_0 , относящиеся к д. с., равны

$$E_{Nn} = -\frac{m_\mu Z^2}{2N^2} - \frac{(Z-1)^2}{2n^2} \quad (2)$$

(N, n — главные квантовые числа для мюона и электрона). Следует, однако, иметь в виду, что при $N \geq 2$ уровни (2) не являются истинными уровнями энергии д. с. рассматриваемой системы «ядро + электрон + мюон», так как из-за взаимодействия мюона с электроном возможна ионизация системы (мюон переходит в основное состояние с $N = 1$, а электрон выбрасывается из атома — так называемый Оже-эффект), так что выражение (2) представляет приближенное значение энергии стационарных состояний системы лишь при $N = 1$. Вид соответствующих в. ф. представляется очевидным.

11.10. Задача решается аналогично 11.4. Оператор взаимодействия электронов с магнитным полем ядра представляется в виде двух слагаемых: $\bar{V} = \bar{V}_1 + \bar{V}_2$, где $\bar{V}_{1(2)}$ описывают взаимодействие каждого из двух электронов с ядром (см. 11.4).

Усредняя оператор \bar{V} по в. ф. $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ пространственного движения электронов в 2^3S -состоянии атома гелия, находим

$$\bar{V} = \frac{8\pi e\hbar\mu}{3mcI} C (\hat{\mathbf{I}}\hat{\mathbf{S}}),$$

где $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ — оператор суммарного спина двух электронов,

$$C = \int |\Psi(0, \mathbf{r}_2)|^2 dV_2 = \int |\Psi(\mathbf{r}_1, 0)|^2 dV_1.$$

С. з. оператора \bar{V} определяют энергетические сдвиги уровня (сверхтонкую структуру). В рассматриваемой задаче $S = 1$, $I = 1/2$; при этом

$$E_{\text{HFS}} = \frac{8\pi e\hbar\mu C}{3mc} \cdot \begin{cases} 1, & J = 3/2, \\ -2, & J = 1/2 \end{cases}$$

(J — полный момент системы «ядро ${}^3\text{He}$ + два электрона»). Величина сверхтонкого расщепления равна

$$\Delta E_{\text{HFS}} = |E_{\text{HFS}}(J = 3/2) - E_{\text{HFS}}(J = 1/2)| = \frac{8\pi e\hbar |\mu| C}{mc}. \quad (1)$$

Воспользовавшись для в. ф. $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ приближенным представлением в виде

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2) - \Psi_2(r_1)\Psi_1(r_2)\},$$

где $\Psi_{1,2}(r)$ — в. ф. водородоподобного атома с $Z = 2$ для $1s$ - и $2s$ -состояний, находим

$$C = \frac{1}{2} (|\Psi_1(0)|^2 + |\Psi_2(0)|^2) = \frac{9}{2\pi a_0^3} \quad (2)$$

(a_0 — боровский радиус).

Численное значение энергии сверхтонкого расщепления согласно (1) и (2) оказывается равным

$$\Delta\nu_{\text{HFS}} = \Delta E_{\text{HFS}}/2\pi\hbar \approx 7300 \text{ МГц.}$$

11.11. В орто-(пара-)состояниях гелиеподобных атомов момент относительного движения электронов может принимать только нечетные (четные) значения.

11.12. В рассматриваемом приближении энергия nL -состояния гелиеподобного атома представляет сумму энергий $\epsilon_0 = -Z^2/2$ основного состояния водородоподобного атома с зарядом ядра Z и $\epsilon_n = -(Z-1)^2/2n^2$ — состояния с главным квантовым числом n в поле экранированного заряда $Z-1$, т. е.

$$E_n = -Z^2/2 - (Z-1)^2/2n^2 \quad (1)$$

(в рассматриваемом приближении значение энергии (1) относится и к орто- и к парасостояниям атома), а потенциал ионизации равен $I_n = (Z-1)^2/2n^2$.

Для $2L$ -состояний гелия приближенное значение потенциала ионизации $I_2 = 0,125$ ат. ед. следует сравнить с экспериментальными значениями:

	2^3S	2^1S	2^3P	2^1P
$I_{\text{эксп}}$	0,175	0,146	0,133	0,124

Экспериментальные значения потенциалов ионизации различных $3L$ -состояний гелия равны:

	3^3S	3^1S	3^3P	3^1P	3^3D	3^1D
$I_{\text{эксп}} \cdot 10^4$	685	612	580	550	560	555

— в то время как согласно данной задаче $I_3 = 556 \cdot 10^{-4}$ ат. ед.

Приближение данной задачи основано, по существу, на возможности пренебрежения «перекрытием» в.ф. $1s$ - и nl -электронов ($l \equiv L$). При $n \gg 1$ это обеспечивается большим размером орбиты nl -электрона и малой вероятностью нахождения его в области локализации $1s$ -электрона (при данном n эта вероятность тем меньше, чем больше значение момента электрона l , поэтому даже при $n = 2; 3$ и $l \neq 0$ приближенные значения E_n, I_n данной задачи хорошо согласуются с экспериментальными данными).

11.13. Правильные функции нулевого приближения пространственного движения электронов имеют вид (с учетом антисимметричности полной в.ф. двух электронов)

$$\Psi_{\pm}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) \pm \Psi_2(r_1) \Psi_1(r_2) \},$$

$$E_{\pm}^{(0)} = -Z^2/2 - Z^2/8 = -5Z^2/8,$$

где знаки «+» и «-» относятся к пара- и ортосостояниям соответственно; $\Psi_{1,2}(r)$ — в.ф. $1s$ - и $2s$ -состояний водородоподобного атома с зарядом ядра Z :

$$\Psi_1(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr}, \quad \Psi_2(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{8\pi}} \left(1 - \frac{Zr}{2} \right) e^{-Zr/2}.$$

Поправку первого порядка к уровням энергии за счет взаимодействия электронов можно записать в виде

$$E_{\pm}^{(1)} = \int \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\Psi_{\pm}^{(0)}|^2 dV_1 dV_2 \equiv K \pm J,$$

где так называемые кулоновский K и обменный J интегралы равны

$$K = \int \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\Psi_1(r_1)|^2 |\Psi_2(r_2)|^2 dV_1 dV_2,$$

$$J = \int \Psi_1^*(r_1) \Psi_2^*(r_1) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \Psi_1(r_2) \Psi_2(r_2) dV_1 dV_2.$$

Имея в виду явный вид функций $\Psi_{1,2}(r)$, легко заметить, что расчет K и J сводится фактически к вычислению нескольких интегралов вида

$$I_{k,n} = \int \frac{r_1^k r_2^n}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} dV_1 dV_2$$

(k, n — целые числа). Такие интегралы легко вычисляются, так как имеет место соотношение

$$I_{k,n} = (-1)^{k+n} \frac{\partial}{\partial \alpha^k} \frac{\partial}{\partial \beta^n} \int \frac{e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 \equiv (-1)^{k+n} \frac{\partial}{\partial \alpha^k} \frac{\partial}{\partial \beta^n} I_{0,0},$$

а интеграл $I_{0,0}$ был вычислен в 11.5 и равен

$$I_{0,0} = \int \frac{e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|r_1 - r_2|} dV_1 dV_2 = 32\pi^2 \left[\frac{1}{\alpha^2 \beta^2 (\alpha + \beta)} + \frac{1}{\alpha \beta (\alpha + \beta)^3} \right].$$

Простое, но несколько утомительное вычисление дает $K = \frac{17}{81} Z$, $J = \frac{16}{729} Z$.

Соответственно в первом порядке теории возмущений значения энергетических уровней и потенциалов ионизации 2^3S - и 2^1S -состояний гелиеподобных атомов равны

$$\begin{aligned} E(2^3S) &= -\frac{5}{8} Z^2 + \frac{137}{729} Z, & E(2^1S) &= -\frac{5}{8} Z^2 + \frac{169}{729} Z, \\ I(2^3S) &= \frac{Z^2}{8} - \frac{137}{729} Z, & I(2^1S) &= \frac{Z^2}{8} - \frac{169}{729} Z. \end{aligned} \quad (1)$$

Численные значения I для атома гелия и иона лития Li^+ согласно (1) равны

$$\begin{aligned} I_{\text{He}}(2^3S) &\approx 0,125 \text{ ат. ед.} \approx 3,40 \text{ эВ,} \\ I_{\text{He}}(2^1S) &\approx 0,037 \text{ ат. ед.} \approx 1,00 \text{ эВ,} \\ I_{\text{Li}^+}(2^3S) &\approx 0,56 \text{ ат. ед.} \approx 15,2 \text{ эВ,} \\ I_{\text{Li}^+}(2^1S) &\approx 0,43 \text{ ат. ед.} \approx 11,7 \text{ эВ.} \end{aligned}$$

Существенное различие рассчитанного и экспериментального значений I (особенно в случае атома гелия) свидетельствует о неудачном «разбиении» гамильтониана на невозмущенную часть H_0 и возмущение V . Это легко понять, если иметь в виду то обстоятельство, что в возбужденных состояниях гелиеподобного атома один из электронов ($1s$) находится, в среднем, существенно ближе к ядру, чем второй (в возбужденном состоянии), и частично экранирует заряд ядра (сравнить с результатом предыдущей задачи). В случае ядра с достаточно малым зарядом Z такая экранировка его заряда $1s$ -электроном существенно сказывается на движении электрона в возбужденном состоянии.

11.14. Нормированная пространственная часть в. ф. 2^3S -состояния системы согласно условию задачи имеет вид

$$\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) - \Psi_2(r_1) \Psi_1(r_2) \}, \quad (1)$$

где $\Psi_{1,2}(r)$ представляют в. ф. $1s$ - и $2s$ -состояний водородоподобного атома с зарядом ядра $Z_{\text{эфф}}$:

$$\Psi_1 = \sqrt{\frac{Z_{\text{эфф}}^3}{\pi}} e^{-Z_{\text{эфф}} r}, \quad \Psi_2 = \sqrt{\frac{Z_{\text{эфф}}^3}{8\pi}} \left(1 - \frac{Z_{\text{эфф}} r}{2} \right) e^{-Z_{\text{эфф}} r/2}. \quad (2)$$

Для вычисления среднего значения энергии в состоянии, описываемом в. ф. (1), удобно записать гамильтониан системы

в виде

$$\hat{H} = \left\{ -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r_1} - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r_2} \right\} - (Z - Z_{\text{эфф}}) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3. \quad (3)$$

Так как в. ф. (1) является с. ф. гамильтониана \hat{H}_1 , то

$$\bar{\hat{H}}_1 = \left\{ -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r_1} - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r_2} \right\} = -\frac{5}{8} Z_{\text{эфф}}^2. \quad (4)$$

Среднее значение оператора \hat{H}_2 согласно теореме вириала равно

$$\bar{\hat{H}}_2 = \frac{Z - Z_{\text{эфф}}}{Z_{\text{эфф}}} \left(-\frac{Z_{\text{эфф}}}{r_1} - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r_2} \right) = -\frac{5}{4} Z_{\text{эфф}} (Z - Z_{\text{эфф}}). \quad (5)$$

Среднее значение оператора \hat{H}_3 можно записать в виде

$$\bar{\hat{H}}_3 = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \equiv K - J, \quad (6)$$

где

$$K = \int \Psi_1^2(r_1) \Psi_2^2(r_2) \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (7)$$

$$J = \int \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_1) \Psi_1(r_2) \Psi_2(r_2) \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (8)$$

Учитывая явный вид в. ф. $\Psi_{1,2}$, интегралы в выражениях (7), (8) легко вычислить (см. по этому поводу 11.13):

$$K = \frac{17}{81} Z_{\text{эфф}}, \quad J = \frac{16}{729} Z_{\text{эфф}}. \quad (9)$$

Таким образом,

$$\bar{E} = \bar{\hat{H}}_1 + \bar{\hat{H}}_2 + \bar{\hat{H}}_3 = \frac{5}{8} Z_{\text{эфф}}^2 - \frac{5}{4} Z Z_{\text{эфф}} + \frac{137}{729} Z_{\text{эфф}},$$

и, минимизируя это значение \bar{E} по параметру $Z_{\text{эфф}}$, легко находим вариационное значение энергии 2^3S -состояния гелиеподобного атома

$$E(2^3S) = \min \bar{E} = -\frac{5}{8} \left(Z - \frac{1096}{7290} \right)^2 \approx -\frac{5}{8} (Z - 0,150)^2$$

т. е. $Z_{\text{эфф}} \approx Z - 0,150$ и потенциал ионизации 2^3S -состояния

$$I(2^3S) = \frac{5}{8} (Z - 0,150)^2 - \frac{Z^2}{2}. \quad (10)$$

Согласно (10) имеем $I = 0,139$ ат. ед. для атома гелия и $I = 0,576$ ат. ед. для иона Li^+ ; эти значения следует сравнить с экспериментальными, равными соответственно 0,175 и 0,605.

11.15. Для того чтобы состояние гелиеподобного атома, отвечающее электронной конфигурации $n'l', nl$, было устойчивым по

отношению к ионизации атома, его энергия $E(n'l', nl)$ должна быть ниже энергии $E_0 = -Z^2/2$ основного состояния соответствующего водородоподобного атома.

Легко заметить, что в пренебрежении взаимодействием между электронами, когда

$$E(n', n) = -\frac{1}{2} Z^2 (1/n'^2 + 1/n^2), \quad (1)$$

энергия состояния, в котором оба электрона возбуждены ($n', n \geq 2$), не удовлетворяет условию устойчивости системы. Представляется очевидным, что учет взаимодействия между электронами, носящего характер отталкивания, лишь повышает энергию системы, и тем самым вывод о неустойчивости состояний гелиеподобной системы, отвечающих электронной конфигурации с обоими возбужденными электронами, сохраняется.

Формальное доказательство того факта, что учет взаимодействия между электронами приводит к повышению энергетических уровней системы, легко получить следующим образом. Рассмотрим гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{\beta}{|r_1 - r_2|},$$

с. з. которого $E(\beta)$, относящиеся к д. с., при $\beta = 1$ представляют уровни энергии реального гелиеподобного атома, а при $\beta = 0$ определяются выражением (1). На основании результата задачи 1.28 имеем

$$\frac{\partial E}{\partial \beta} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \beta} = \frac{1}{|r_1 - r_2|} > 0,$$

что и требовалось доказать.

11.16. Задача решается аналогично предыдущей. Для того чтобы состояние литиеподобного атома, отвечающее электронной конфигурации $n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3$, было устойчивым, его энергия должна быть ниже энергии E_0 основного состояния соответствующего гелиеподобного атома: $E(n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3) < E_0$. В пренебрежении взаимодействием между электронами имеем

$$E(n_1, n_2, n_3) = -\frac{1}{2} Z^2 (1/n_1^2 + 1/n_2^2 + 1/n_3^2). \quad (1)$$

Минимальное значение энергии (1) для состояний, в которых лишь один электрон находится в основном состоянии (а два других — в возбужденных), равно $E_{\min} = -3Z^2/4$ (ему соответствуют квантовые числа $n_1 = 1, n_2 = n_3 = 2$). Легко убедиться, что при $Z \geq 3$ имеет место неравенство $E_{\min} > -(Z - 5/16)^2 > E_0$ (мы воспользовались результатом задачи 11.7), из которого следует неустойчивость состояний литиеподобных атомов, в которых два электрона возбуждены, по отношению к ионизации системы (по поводу учета взаимодействия между электронами см. предыдущую задачу).

11.17. Энергию состояния литиеподобного атома с электронной конфигурацией $(1s)^2nl$ можно приближенно представить в виде суммы двух слагаемых: E_0 — энергии основного состояния соответствующего гелиеподобного атома, сопоставляемой двум электронам в $1s$ -состоянии, и энергии nl -электрона в кулоновском поле ядра, заряд которого заэкранирован двумя электронами, т. е.

$$E_n = E_0 - (Z - 2)^2/2n^2.$$

В этом приближении потенциал ионизации равен $I_n = (Z - 2)^2/2n^2$. Его численное значение для нижних (по энергии) S - и P -состояний атома лития одинаково и равно $I_2 = 1/8 = 0,125$ ат. ед. $\approx 3,40$ эВ, в то время как экспериментальные значения $I(S) = 5,37$ эВ и $I(P) = 3,52$ эВ. Решение данной задачи полезно сравнить с решением задачи 11.12.

11.18. Гамильтониан трехэлектронного атома

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^3 \left(-\frac{1}{2} \Delta_a - \frac{Z}{r_a} \right) + \sum_{a < b} \frac{1}{|r_a - r_b|}, \quad (1)$$

а электронная конфигурация основного состояния — $(1s)^22s$.

В соответствии с условием задачи одноэлектронные в. ф. $1s$ - и $2s$ -электронов выбираем в виде

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{Z_{\text{эфф}}^3}{\pi}} e^{-Z_{\text{эфф}} r}, \quad \psi_1 = \sqrt{\frac{Z_{\text{эфф}}^3}{8\pi}} \left(1 - \frac{Z_{\text{эфф}} r}{2} \right) e^{-Z_{\text{эфф}} r/2}. \quad (2)$$

а) Найдем $\bar{E}(Z_{\text{эфф}})$ в состоянии, описываемом в. ф.

$$\Psi = \psi_0(r_1) \psi_0(r_2) \psi_1(r_3) \chi, \quad (3)$$

где χ — спиновая часть в. ф., и, минимизируя полученное значение по параметру $Z_{\text{эфф}}$, получим приближенное значение энергии основного состояния атома вариационным методом: $E_0 \approx \min \bar{E}(Z_{\text{эфф}})$.

Прежде чем провести вычисления, отметим несколько важных обстоятельств.

Строго говоря, в. ф. (3) не описывает никакого физически реализуемого состояния трехэлектронной системы, так как ни при каком выборе спиновой функции χ такая в. ф., очевидно, не удовлетворяет условию ее антисимметричности по отношению к перестановке переменных любых двух тождественных фермионов (электронов). В. ф. системы с требуемой симметрией легко получить, выбрав, например, χ в виде

$$\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_3 \quad (4)$$

$\left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_a \right)$ — спиновая в. ф. a -й частицы с определенным значением $s_z = +1/2$ и т. д.) и произведя стандартную антисимметризацию в. ф. (см. ниже). Однако, хотя получение «правильной» в. ф.

само по себе не вызывает затруднений, вычисления с использованием такой в. ф. становятся более трудоемкими. В этом смысле расчет величины E_0 с использованием «простой» в. ф. (3) основан на предположении, что пренебрежение антисимметризацией в. ф. (а тем самым и последовательным учетом обменных эффектов в рассматриваемом приближении) не очень сильно влияет на окончательный результат. В связи с этим важно иметь в виду, что использование неантисимметризованной в. ф. (3) не означает *полного* пренебрежения обменными эффектами, связанными с тождественностью частиц: выбор ее в качестве в. ф. основного состояния трехэлектронной системы уже эффективно отражает то обстоятельство, что электроны являются тождественными фермионами. Действительно, в в. ф. (3) уже учтен принцип Паули, так как на нижнем одночастичном $1s$ -уровне находятся лишь два электрона из трех. В этом аспекте для гипотетического атома, содержащего вместо электронов бесспиновые частицы — бозоны, в качестве в. ф. основного состояния следовало бы взять

$$\Psi = \psi_0(r_1) \psi_0(r_2) \psi_0(r_3).$$

Вычисления с такой в. ф. никакого отношения к обычным, электронным атомам, конечно, не имеют.

Перейдем к расчету E . Для этого представим гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \overline{\sum_a \left(-\frac{\Delta_a}{2} - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r_a} \right)} + \frac{Z - Z_{\text{эфф}}}{Z_{\text{эфф}}} \sum_a \left(-\frac{Z_{\text{эфф}}}{r_a} \right) + \sum_{a < b} \frac{1}{|r_a - r_b|}. \quad (5)$$

Так как

$$\left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r} \right) \psi_{0,1} = \varepsilon_{0,1} \psi_{0,1}, \quad \varepsilon_0 = -\frac{Z_{\text{эфф}}^2}{2}, \quad \varepsilon_1 = -\frac{Z_{\text{эфф}}^2}{8}, \quad (6)$$

то

$$\overline{\sum_a \left(-\frac{\Delta_a}{2} - \frac{Z_{\text{эфф}}}{r_a} \right)} = 2\varepsilon_0 + \varepsilon_1 = -\frac{9}{8} Z_{\text{эфф}}^2. \quad (7)$$

Далее, среднее значение

$$\begin{aligned} \frac{Z - Z_{\text{эфф}}}{Z_{\text{эфф}}} \overline{\sum_a \left(-\frac{Z_{\text{эфф}}}{r_a} \right)} &= \frac{Z - Z_{\text{эфф}}}{Z_{\text{эфф}}} 2(2\varepsilon_0 + \varepsilon_1) = \\ &= -\frac{9}{4} Z_{\text{эфф}} (Z - Z_{\text{эфф}}) \end{aligned} \quad (8)$$

непосредственно следует из теоремы вириала.

Наконец, среднее значение последней суммы в выражении (5) равно

$$\overline{\sum_{a < b} \frac{1}{|r_a - r_b|}} = K_1 + 2K_2,$$

где

$$K_1 = \int |\psi_0(r_1)|^2 |\psi_0(r_2)|^2 \frac{dV_1 dV_2}{|r_1 - r_2|} = \frac{Z_{\text{эфф}}^6}{\pi^2} \int \frac{e^{-2Z_{\text{эфф}}(r_1+r_2)}}{|r_1 - r_2|} dV_1 dV_2 = \frac{5}{8} Z_{\text{эфф}}, \quad (9)$$

$$K_2 = \int |\psi_0(r_1)|^2 |\psi_1(r_3)|^2 \frac{dV_1 dV_2}{|r_1 - r_3|} = \frac{17}{81} Z_{\text{эфф}}$$

(интеграл K_1 был вычислен в 11.5, а K_2 — в 11.13).

В результате получаем

$$\bar{E}(Z_{\text{эфф}}) = \frac{9}{8} \left[Z_{\text{эфф}}^2 - 2 \left(Z - \frac{677}{1458} \right) Z_{\text{эфф}} \right].$$

Минимизируя по параметру $Z_{\text{эфф}}$, находим искомое вариационное значение энергии основного состояния:

$$E_{0, \text{вар}} = \min \bar{E}(Z_{\text{эфф}}) = -\frac{9}{8} \left(Z - \frac{677}{1458} \right)^2 = -\frac{9}{8} (Z - 0,4643)^2. \quad (10)$$

Численное значение (10) для атома лития ($Z = 3$) равно

$$E_{0, \text{вар}} \approx -7,235 \text{ ат. ед.}$$

б) В. ф. трехэлектронной системы, получающаяся в результате стандартной антисимметризации в. ф. (3) с χ в виде (4), определяется известным детерминантом:

$$\tilde{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_0(r_1) \alpha(1) & \psi_0(r_2) \alpha(2) & \psi_0(r_3) \alpha(3) \\ \psi_0(r_1) \beta(1) & \psi_0(r_2) \beta(2) & \psi_0(r_3) \beta(3) \\ \psi_1(r_1) \alpha(1) & \psi_1(r_2) \alpha(2) & \psi_1(r_3) \alpha(3) \end{vmatrix}, \quad (11)$$

где $\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ — спиновые функции. В. ф. (11) описывает состояние атома с суммарным спином $S = 1/2$ и $S_z = +1/2$; очевидно также $L = 0$ (основной терм $-^2S$).

Для вычисления среднего значения гамильтониана (5) в состоянии, описываемом в. ф. $\tilde{\Psi}$ (11), замечаем, что средние значения первой и второй сумм в (5) точно такие же, как и до антисимметризации в. ф., т. е. определяются выражениями (7) и (8). Для вычисления же средней энергии взаимодействия электронов друг с другом достаточно найти $|r_1 - r_2|^{-1}$ и умножить это значение на 3.

Запишем явный вид в. ф. (11):

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ & \psi_0(1) \alpha(1) \psi_0(2) \beta(2) \psi_1(3) \alpha(3) + \\ & + \psi_0(1) \beta(1) \psi_1(2) \alpha(2) \psi_0(3) \alpha(3) + \psi_1(1) \alpha(1) \psi_0(2) \alpha(2) \psi_0(3) \beta(3) - \\ & - \psi_1(1) \alpha(1) \psi_0(2) \beta(2) \psi_0(3) \alpha(3) - \psi_0(1) \alpha(1) \psi_1(2) \alpha(2) \psi_0(3) \beta(3) - \\ & - \psi_0(1) \beta(1) \psi_0(2) \alpha(2) \psi_1(3) \alpha(3) \}. \end{aligned}$$

Расчет $\overline{\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}} = \int \tilde{\Psi}^* \overline{\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}} \tilde{\Psi} d\tau$ включает вычисление $6 \times 6 = 36$ интегралов. Однако, учитывая ортогональность функций ψ_0 и ψ_1 , α и β , легко заметить, что многие из таких интегралов равны нулю, а отличные от нуля интегралы равны

$$\begin{aligned} \langle 1 || \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 |^{-1} | 1 \rangle &= \langle 6 | \dots | 6 \rangle = \int |\psi_0(r_1)|^2 |\psi_0(r_2)|^2 \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = K_1, \\ \langle 2 || \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 |^{-1} | 2 \rangle &= \langle 3 | \dots | 3 \rangle = \langle 4 | \dots | 4 \rangle = \langle 5 | \dots | 5 \rangle = \\ &= \int |\psi_0(r_1)|^2 |\psi_1(r_2)|^2 \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = K_2, \\ \langle 5 || \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 |^{-1} | 3 \rangle &= \langle 3 | \dots | 5 \rangle = \\ &= - \int \psi_0^*(r_1) \psi_1^*(r_1) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_0(r_2) \psi_1(r_2) dV_1 dV_2 = -J, \end{aligned}$$

где K_1, K_2 определяются выражениями (9), а обменный интеграл $J = (16/729) Z_{\text{эфф}}$ был вычислен в 11.13.

Окончательное выражение для средней потенциальной энергии взаимодействия электронов друг с другом имеет вид

$$\sum_{a < b} \overline{\frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}} = 3 \cdot \frac{1}{6} (2K_1 + 4K_2 - 2J) = \frac{5965}{5832} Z_{\text{эфф}},$$

и среднее значение \bar{E} оказывается равным

$$\bar{E}(Z_{\text{эфф}}) = \frac{9}{8} \left[Z_{\text{эфф}}^2 - 2 \left(Z - \frac{5965}{13 \cdot 122} \right) Z_{\text{эфф}} \right].$$

Минимизируя \bar{E} по параметру $Z_{\text{эфф}}$, находим вариационное значение энергии основного состояния:

$$E_{0, \text{вар}} = -\frac{9}{8} \left(Z - \frac{5965}{13 \cdot 122} \right)^2 = -\frac{9}{8} (Z - 0,4622)^2. \quad (12)$$

Численное значение (12) для атома лития равно

$$E_{0, \text{вар}} \approx -7,245 \text{ ат. ед.} \quad (13)$$

Полученные результаты (12), (13) лишь незначительно отличаются от установленных в пункте а) с более простой в. ф.

11.19. а) $^1P_1; ^3P_{0,1,2}$; б) $^1S_0; ^1P_1; ^1D_2; ^3S_1; ^3P_{0,1,2}; ^3D_{1,2,3}$;

в) $^1P_1; ^1D_2; ^1F_3; ^3P_{0,1,2}; ^3D_{1,2,3}; ^3F_{2,3,4}$.

11.20. а) $^1S_0; ^1D_2; ^3P_{0,1,2}$; б) $^2P_{1/2,3/2}; ^2D_{3/2,5/2}; ^4S_{3/2}$; в) $^1S_0; ^1D_2;$

$^3P_{0,1,2}$; г) $^1S_0; ^1D_2; ^1G_4; ^3P_{0,1,2}; ^3F_{2,3,4}$.

Нормальными термами являются $^3P_0, ^4S_{3/2}, ^3P_2, ^3F_2$ соответственно в случаях а) — г).

11.21. Электронная конфигурация основного состояния атома азота имеет вид $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$ и нормальный терм (см. предыдущую задачу) $^4S_{3/2}$. То же самое — в случае атома хлора: $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5$ и $^2P_{3/2}$.

Электронные конфигурации ионов рассматриваемых элементов, относящихся к главным группам, такие же, как у соответствующих предыдущих атомов (С и S), т. е.

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^2 \text{ и нормальный терм } {}^3P_0 \text{ для иона } N^+,$$

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^4, {}^3P_2 \text{ для иона } Cl^+.$$

11.22. Так как четность состояния одной частицы с моментом l равна $(-1)^l$ и четность является мультипликативной величиной (четность системы равна произведению четностей составляющих ее подсистем, и поэтому четность системы электронов, образующих заполненную оболочку, положительна), то, очевидно, четность I равна: а) $I = +1$, б) $I = (-1)^k$; в) $I = +1$; г) $I = (-1)^k$.

11.23. В. ф. двух электронов должна быть антисимметрична по отношению к перестановке спиновых и пространственных переменных обеих частиц. Учитывая, что радиальная зависимость в. ф. двух эквивалентных электронов симметрична по отношению к перестановке переменных r_1 и r_2 , характер симметрии спиновой части в. ф. зависит от значения S суммарного спина (при $S = 0$ спиновая в. ф. антисимметрична, а при $S = 1$ она симметрична по отношению к перестановке спиновых переменных), а характер симметрии угловой зависимости в. ф. зависит от значения L суммарного момента (см. 3.39), легко находим значения S и L возможных атомных термов для конфигурации $(nl)^2$:

$$S = 0, \quad L = 2l, 2l - 2, 2l - 4, \dots, 0 \quad (\text{синглетные термы}),$$

$$S = 1, \quad L = 2l - 1, 2l - 3, \dots, 1 \quad (\text{триплетные термы, } l \neq 0).$$

11.24. Максимально возможное значение проекции S_z суммарного спина системы рассматриваемых электронов и максимально возможное при этом значение проекции L_z суммарного орбитального момента определяются размещением электронов по следующим состояниям с определенными значениями величин l_z, s_z :

$$l, 1/2; \quad l - 1, 1/2; \quad l - 2, 1/2; \quad \dots; \quad l - k + 1, 1/2$$

(мы считаем пока, что $k \leq 2l + 1$, т. е. оболочка заполнена не более чем наполовину; см. ниже). Очевидно,

$$S_{\max} = (S_z)_{\max} = k/2$$

и

$$L_{\max} = (L_z)_{\max} = \sum_{n=0}^{k-1} (l - n) = \frac{k(2l + 1 - k)}{2}.$$

Полученные значения S_{\max}, L_{\max} определяют квантовые числа S, L нормального терма, при этом значение полного момента

равно $J = |L - S| = |L_{\max} - S_{\max}|$ (оболочка заполнена не более чем наполовину).

При $k > 2l + 1$ (оболочка заполнена более чем наполовину) значения S, L основного терма определяются полученными выше выражениями для $k \leq 2l + 1$, в которых следует заменить k на $[2(2l + 1) - k]$; при этом значение полного момента атома равно $J = L + S$.

11.25. В условиях задачи число различных независимых состояний отдельных электронов (из оболочки nl) равно $2(2l + 1)$. Число способов, которыми можно разместить по этим состояниям k электронов с учетом принципа Паули, равно, очевидно,

$$C_{2(2l+1)}^k = \frac{[2(2l+1)]!}{k! [2(2l+1) - k]!}$$

и представляет искомое число различных состояний атома с электронной конфигурацией $(nl)^k$.

11.26. Спиновая часть в. ф. состояния трех электронов с суммарным спином $S = 3/2$ симметрична по отношению к перестановке спиновых переменных любых двух частиц (см. 5.32). В силу эквивалентности электронов симметрична также и радиальная зависимость в. ф., т. е. в. ф. не изменяется при перестановке радиальных переменных r_a электронов. Поэтому в соответствии с принципом Паули угловая зависимость в. ф. должна быть антисимметричной по отношению к перестановке угловых переменных любых двух электронов. Угловая зависимость в. ф. однозначно определяется заданием квантовых чисел m_1, m_2, m_3 — проекций орбитальных моментов отдельных электронов, а антисимметричный характер этой зависимости требует, чтобы эти числа m_a были различными. Учитывая возможные значения величин m_a , легко сообразить, что число различных состояний в пространстве угловых переменных равно ($l \geq 1$)

$$C_{2l+1}^3 = \frac{(2l+1)!}{3!(2l-2)!}, \quad (1)$$

а искомое число различных состояний атома получается умножением (1) на 4 (число различных спиновых состояний).

11.27. Пространственная часть в. ф. стационарных состояний атома имеет вид

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) \pm \Psi_2(r_1) \Psi_1(r_2) \}, \quad (1)$$

где знаки «+» и «-» относятся к синглетным и триплетным состояниям атома соответственно, $\Psi_1(r)$ и $\Psi_2(r)$ представляют в. ф. ns - и $n'l$ -электронов (строго говоря, выражение (1) представляет часть в. ф., связанную с электронами, находящимися вне заполненных оболочек; электроны же заполненных оболочек не рассматриваются явно, однако наличие их проявляется

эффективно в конкретном виде в. ф. $\Psi_{1,2}$, определяемом самосогласованным полем).

В пренебрежении взаимодействием ns - и $n'l$ -электронов друг с другом в. ф. (1) отвечают одинаковой энергии, изменение которой за счет взаимодействия электронов равно

$$E_{\pm} = K \pm J, \quad (2)$$

где обменный интеграл

$$J = \iint \Psi_1^*(r_1) \Psi_2^*(r_2) \frac{1}{|r_1 - r_2|} \Psi_1(r_2) \Psi_2(r_1) dV_1 dV_2 \quad (3)$$

определяет энергетическое расщепление синглетного и триплетного термов.

Покажем, что $J > 0$. Замечая, что без ограничения общности в. ф. Ψ_1 можно считать вещественной, и представив Ψ_2 в виде $\Psi_2 = \chi_1 + i\chi_2$, где $\chi_{1,2}$ — вещественные функции, перепишем выражение (3) в виде

$$J = \iint \frac{1}{|r_1 - r_2|} \Psi_1(r_1) \Psi_1(r_2) \{ \chi_1(r_1) \chi_1(r_2) + \chi_2(r_1) \chi_2(r_2) \} dV_1 dV_2. \quad (4)$$

Положительность выражения (4) следует из известных формул электростатики для энергии электростатического поля, создаваемого распределением заряда с объемной плотностью $\rho(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{8\pi} \int \mathcal{E}^2(\mathbf{r}) dV = \frac{1}{2} \int \varphi(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) dV = \\ &= \frac{1}{2} \iint \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rho(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}) dV dV' > 0. \end{aligned}$$

Итак, $J > 0$ и из (2) следует утверждение задачи.

11.28. Нормированная в. ф. отдельного электрона имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (\mathbf{a}\mathbf{n}) \varphi(r); \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad |\mathbf{a}|^2 = 1.$$

Пространственную часть в. ф. системы из двух np -электронов с определенным значением L суммарного орбитального момента можно представить в виде

$$\Psi_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = a_{ik}(L) n_{1i} n_{2k} \varphi(r_1) \varphi(r_2), \quad (1)$$

где свойства тензора $a_{ik}(L)$ зависят от значения L :

$$a_{ik} = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{16\pi^2}} \delta_{ik}, & L = 0 \quad (S\text{-терм}), \\ \sqrt{\frac{9}{32\pi^2}} \epsilon_{ikl} b_l; \quad |\mathbf{b}|^2 = 1, & L = 1 \quad (P\text{-терм}), \\ a_{ki}; \quad a_{ii} = 0, \quad a_{ik} a_{ik}^* = \frac{9}{16\pi^2}, & L = 2 \quad (D\text{-терм}) \end{cases} \quad (2)$$

(отметим, что согласно (1) и (2) в ф. S - и D -термов симметричны по отношению к перестановке пространственных переменных электронов и, следовательно, эти термы являются синглетными, P -терм является триплетным).

В пренебрежении взаимодействием между электронами все термы имеют одинаковую энергию, изменение которой за счет взаимодействия

$$E_L^{(1)} = \int |\Psi_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2$$

можно записать в виде

$$E_L^{(1)} = 2a_{ik} a_{lm}^* \int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 r_1^2 r_2^2 \varphi^2(r_1) \varphi^2(r_2) \iint \frac{n_{1i} n_{2k} n_{1l} n_{2m} d\Omega_1 d\Omega_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 n_{1l} n_{2l}}}. \quad (3)$$

Выполним в (3) интегрирование по угловым переменным первого электрона. Представив входящий сюда интеграл в виде

$$\int \frac{n_{1i} n_{1l} d\Omega_1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 n_{1l} n_{2l}}} = A \delta_{il} + B n_{2i} n_{2l} \quad (4)$$

и один раз свернув выражение (4) по индексам i и l , а другой раз — умножив обе части этого соотношения на $n_{2i} n_{2l}$, находим соответственно

$$3A + B = \int_{-1}^1 \frac{2\pi z dz}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 z}} = \frac{4\pi}{r_2} \quad (\text{напомним: } r_2 \geq r_1), \quad (5)$$

$$A + B = \int_{-1}^1 \frac{2\pi z^2 dz}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 z}} = \frac{\pi}{3r_2^3} (4r_2^2 + r_1^2)$$

(при вычислении интегралов по θ_1, φ_1 полярную ось удобно направить вдоль вектора \mathbf{n}_2).

Далее, выполним интегрирование по угловым переменным второго электрона, учитывая известные соотношения

$$\int n_i n_k d\Omega = \frac{4\pi}{3} \delta_{ik}, \quad \int n_i n_k n_l n_m d\Omega = \frac{4\pi}{15} (\delta_{ik} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}).$$

В результате выражение (3) принимает вид

$$E_L^{(1)} = 2a_{ik}(L) a_{lm}^*(L) \int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 r_1^2 r_2^2 \varphi^2(r_1) \varphi^2(r_2) \times \\ \times \left[\frac{4\pi}{3} \delta_{il} \delta_{km} A + \frac{4\pi}{15} (\delta_{ik} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) B \right]. \quad (6)$$

Учитывая явное выражение (2) для компонент тензора a_{ik} в состояниях с определенным значением L и значения A, B со-

гласно (5), формулу (6) можно представить в виде

$$E_L^{(1)} = 2 \int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 r_1^2 r_2^2 \varphi^2(r_1) \varphi^2(r_2) \left[1 + b_L \frac{r_1^2}{r_2^2} \right], \quad (7)$$

где

$$b_L = \begin{cases} 1/4, & L=0, \\ -1/8, & L=1, \\ 1/40, & L=2. \end{cases} \quad (8)$$

Согласно (7) и (8) энергии термов удовлетворяют условию

$$E^{(1)}(^3P) < E^{(1)}(^1D) < E^{(1)}(^1S),$$

и нормальным является терм 3P в согласии с правилом Гунда. Отметим, что из (7,8) следует соотношение

$$\frac{E(^1D) - E(^3P)}{E(^1S) - E(^1D)} = \frac{2}{3} \approx 0,67 \quad (9)$$

для энергетических уровней термов, связанных с конфигурацией $(np)^2$, которое интересно уже потому, что не зависит от конкретного вида в. ф. np -электрона в атоме и поэтому может быть использовано в качестве критерия точности рассматриваемого приближения. В связи с этим укажем, что для атома ^{32}Ge , имеющего электронную конфигурацию $(4p)^2$ сверх заполненных оболочек, экспериментальное значение отношения (9) равно 0,77.

11.29. Как известно, в модели Томаса — Ферми пространственное распределение электронов в нейтральном атоме описывается объемной плотностью $n(r)$ вида

$$n(r) = \frac{32Z^2}{9\pi^3} \left[\frac{\chi(x)}{x} \right]^{3/2}, \quad x = \frac{rZ^{1/3}}{b},$$

где Z — заряд ядра, $b = 1/2(3\pi/4)^{2/3} \approx 0,885$, $\chi(x)$ — универсальная функция модели. Функция $n(r)$ нормирована на полное число электронов, равное Z , т. е. $\int n(r) dV = Z$, и поэтому функция

$$\omega(r) = \frac{1}{Z} n(r) \quad (1)$$

имеет смысл функции распределения по координатам отдельного электрона. Учитывая это обстоятельство, легко находим

$$\bar{r}^n = \int r^n \omega(r) dV = \frac{4\pi}{Z} \int n(r) r^{n+2} dr = C_n Z^{-n/3}, \quad (2)$$

где

$$C_n = b^n \int_0^\infty x^{n+2} \left[\frac{\chi(x)}{x} \right]^{3/2} dx. \quad (3)$$

В частности, $\bar{r} \propto Z^{-1/3}$, т. е. электроны находятся в среднем на расстоянии от ядра, убывающем с ростом Z как $Z^{-1/3}$.

Функция $\chi(x)$ при $x \rightarrow \infty$ имеет вид $\chi \propto x^{-3}$, и из (3) следует, что при $n \geq 3$ будет $\bar{r}^n = \infty$. Этот результат — свойство модели, приводящей к слишком медленному убыванию $n(r)$ на больших расстояниях, где она, как известно, неприменима (в реальных атомах электронная плотность на больших расстояниях убывает экспоненциально).

11.30. Как известно, в модели Томаса — Ферми максимальное значение $p_0(r)$ импульса электронов в точке r связано с объемной плотностью электронов $n(r)$ соотношением

$$\frac{p_0^3(r)}{3\pi^2} = n(r) = \frac{32Z^2}{9\pi^3} \left[\frac{\chi(x)}{x} \right]^{3/2}, \quad x = \frac{rZ^{1/3}}{b},$$

где $\chi(x)$ — универсальная функция модели. Переписав это соотношение в виде

$$f(x) \equiv \frac{\chi(x)}{x} = \left(\frac{3\pi p_0^3(r)}{32Z^2} \right)^{2/3} \equiv y, \quad (1)$$

введем функцию $g(y)$, обратную функции $y = f(x)$:

$$x = f^{-1}(y) = g(y). \quad (2)$$

Так как функция $\chi(x)/x$, как и $\chi(x)$, является монотонно убывающей функцией переменной x , то функция $g(y)$ — однозначно определенная и монотонная (отметим, что $g(0) = \infty$, $g(\infty) = 0$).

В модели Томаса — Ферми движение электронов в самосогласованном поле рассматривается квазиклассически, причем все числа заполнения состояний д. с. равны 1. Так как число состояний равно

$$\Delta N = \frac{2\Delta\Gamma}{(2\pi)^3} = \frac{2\Delta V_q \Delta V_p}{(2\pi)^3} \quad (\hbar = 1),$$

то при выборе $\Delta V_p \equiv d^3p$, а в качестве ΔV_q — объема, в котором электроны могут иметь импульс p , величина ΔN имеет смысл числа электронов, импульсы которых заключены в соответствующем интервале d^3p . Значение ΔV_q легко получить на основании соотношений (1), (2):

$$\Delta U_q = \frac{4\pi}{3} r^3(p) = \frac{4\pi b^3}{3Z} x^3(p) = \frac{4\pi b^3}{3Z} \left\{ g \left[\left(\frac{3\pi p^3}{32Z^2} \right)^{2/3} \right] \right\}^3,$$

и окончательное выражение для распределения электронов по импульсам в модели Томаса — Ферми принимает вид ($b = (3\pi/4)^{2/3}/2$)

$$dn(p) = \frac{3}{128Z} \left\{ g \left[\left(\frac{3\pi p^3}{32Z^2} \right)^{2/3} \right] \right\}^3 d^3p. \quad (3)$$

По смыслу вывода распределение (3) нормировано на полное число электронов $\int dn(p) = Z$ (это можно доказать и непосред-

ственно). Поэтому выражение $d\omega = \frac{1}{Z} dn$ представляет функцию распределения по импульсам отдельного электрона. Легко находим

$$\overline{p^n} = \int p^n d\omega = \tilde{C}_n Z^{2n/3}, \quad (4)$$

где

$$\tilde{C}_n = \frac{1}{3} \left(\frac{32}{3\pi} \right)^{n/3} \int_0^\infty x^{n/3} g^3(x^{2/3}) dx.$$

Согласно формуле (4) характерная величина импульса электрона в атоме растет с ростом Z пропорционально $Z^{2/3}$. Этот результат можно было бы получить более просто (не прибегая к рассмотрению распределения электронов по импульсам), воспользовавшись теоремой вириала и учтя, что, согласно предыдущей задаче, характерные расстояния в атоме пропорциональны $Z^{-1/3}$. Читателю предлагается самостоятельно проделать соответствующие оценки.

11.31. Учитывая, что характерные расстояния в атоме убывают с ростом Z , как $Z^{-1/3}$, а импульсы электронов растут пропорционально $Z^{2/3}$ (см. предыдущие две задачи), легко находим:

$$a) \quad l_{\text{хар}} \sim r_{\text{хар}} p_{\text{хар}} \propto Z^{-1/3} Z^{2/3} = Z^{1/3};$$

б) энергия взаимодействия электронов с ядром $U_{\text{е яд}} \sim -Z \frac{Z}{r_{\text{хар}}} \propto -Z^{7/3}$; энергия взаимодействия двух электронов друг с другом является величиной порядка $1/r_{\text{хар}} \propto Z^{1/3}$, а полная энергия взаимодействия всех электронов друг с другом $U_{\text{е е}} \sim Z^2 Z^{1/3} = Z^{7/3}$ (число пар электронов равно $Z(Z-1)/2$, а $Z \gg 1$); кинетическая энергия всех электронов пропорциональна $T_{\text{е}} \sim Z p_{\text{хар}}^2 \propto Z^{7/3}$. Таким образом, полная энергия атома и равная ей по величине, но противоположная по знаку энергия полной ионизации атома в модели Томаса — Ферми имеют зависимость от Z вида $E_{\text{полн. ион}} \propto Z^{7/3}$.

11.32. Уровни энергии s -электронов определяются квазиклассическим правилом квантования ($U = -\varphi(r)$).

$$\int_0^{r_0} \sqrt{2[E_n + \varphi(r)]} dr = \pi(n + \gamma). \quad (1)$$

По смыслу распределения Томаса — Ферми (в каждом состоянии — один электрон) число s -электронов равно удвоенному (с учетом спина) числу значений $(n + \gamma)$, для которых $E_n \leq E_{\text{max}}$, где E_{max} — максимальное значение полной энергии томас-фермиевского электрона. Для нейтрального атома это

значение равно нулю, так что $r_0 = \infty$. Поэтому максимальное значение n_{\max} определяется из равенства

$$n_{\max} \approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \sqrt{2\varphi(r)} dr \quad (2)$$

(мы опустили величину $\gamma \sim 1$ в выражении (1), так как проводимое рассмотрение предполагает $n \gg 1$). Переходя к томас-фермиевским единицам: $r = xbZ^{-1/3}$, $b = 0,885$, $\varphi(r) = \frac{Z^{4/3}}{b} \frac{\chi(x)}{x}$, получаем решение задачи

$$n(l=0) \approx 2n_{\max} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2b} Z^{1/3} \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{\chi(x)}{x}} dx \sim Z^{1/3}.$$

11.33. В модели Томаса — Ферми максимальная кинетическая энергия электронов в точке r равна

$$T_{\max} = \frac{1}{2} [3\pi^2 n(r)]^{2/3},$$

и так как средняя кинетическая энергия равна $T = \frac{3}{5} T_{\max}$, то кинетическая энергия всех электронов в атоме

$$T = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int n^{5/3}(r) dV. \quad (1)$$

Потенциал $\varphi_e(0)$, создаваемый электронами в начале координат $r = 0$, где находится ядро, и энергия их взаимодействия с ядром равны

$$U_{e \text{ яд}} = Z\varphi_e(0) = -Z \int \frac{n(r)}{r} dV. \quad (2)$$

Энергия взаимодействия электронов друг с другом определяется известным из электростатики выражением

$$U_{ee} = \frac{1}{2} \int \rho_e \varphi_e dV = \frac{Z}{2} \int \frac{n(r)}{r} dV - \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{4} \int n^{5/3}(r) dV, \quad (3)$$

в котором учтено, что $\rho_e = -n(r)$, $\varphi_e = \varphi - \frac{Z}{r} = \frac{1}{2} (3\pi^2 n)^{2/3} - \frac{Z}{r}$.

Из (1) — (3) элементарно следует соотношение

$$5T + 6U_{ee} + 3U_{e \text{ яд}} = 0, \quad (4)$$

и с учетом теоремы вириала

$$E = T + U_{ee} + U_{e \text{ яд}} = -T \quad (5)$$

(отметим, что величины T , U_{ee} , $U_{e \text{ яд}}$ имеют смысл соответствующих квантовомеханических средних в квазиклассическом при-

ближении) легко находим

$$E = -E_{\text{полн. ион}} = \frac{3}{7} U_{\text{е яд}} = \frac{3Z}{7} \varphi_{\text{е}}(0), \quad T = -\frac{3}{7} U_{\text{е яд}},$$

$$U_{\text{е е}} = -\frac{1}{7} U_{\text{е яд}}.$$

Учитывая значение $\varphi_{\text{е}}(0) = -1,80Z^{4/3}$, получаем энергию полной ионизации нейтрального атома в модели Томаса — Ферми: $E_{\text{полн. ион}} \approx 0,77Z^{7/3}$ ат. ед. $\approx 21,0Z^{7/3}$ эВ.

11.34. Получим выражение для энергии атома с зарядом ядра Z в квазиклассическом приближении через объемную плотность электронов $n(r)$ (подлежащую определению!). Энергия взаимодействия электронов друг с другом $U_{\text{е е}}$ и с ядром $U_{\text{е яд}}$ определяется хорошо известными формулами электростатики:

$$U_{\text{е яд}} = -Z \int \frac{n(r)}{r} dV,$$

$$U_{\text{е е}} = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dV dV' = \frac{1}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dV dV'. \quad (1)$$

Кинетическая энергия электронов определяется из условия, что они распределены с числами заполнения $n_k = 1$ по нижним энергетическим состояниям в самосогласованном электростатическом поле (также подлежащем определению!), и равна

$$T = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int n^{5/3}(r) dV \quad (2)$$

(это выражение для T является непосредственным следствием квазиклассической формулы для числа состояний электрона $\Delta N = 2 \Delta \Gamma / (2\pi)^3 = 2 \Delta V_q \Delta V_p / (2\pi)^3$, которая при $\Delta V_q = 1$ и $\Delta V_p = 4\pi p_{\text{max}}^3 / 3$ связывает плотность числа частиц $n = \Delta N$ с p_{max} ; $\overline{p^2} = 3/5 p_{\text{max}}^2$).

Итак, энергия атома (или иона) представляется в виде

$$E[n(r)] = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10} \int n^{5/3} dV - Z \int \frac{n}{r} dV + \frac{1}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dV dV'. \quad (3)$$

Вариация функционала $E[n(r)]$ равна

$$\delta E = \int \delta n(r) \left\{ \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{2} n^{2/3}(r) - \frac{Z}{r} + \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dV' \right\} dV,$$

и условие его экстремальности (как легко сообразить, минимальности) $\delta E = 0$,

$$\frac{(3\pi^2)^{2/3}}{2} n^{2/3}(r) - \frac{Z}{r} + \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dV' = 0, \quad (4)$$

дает интегральное уравнение для определения функции $n(r)$, минимизирующей энергию атома.

Поддействовав оператором Δ на обе части уравнения (4) и учитывая известное соотношение $\Delta \frac{1}{|r-r'|} = -4\pi\delta(r-r')$, получаем дифференциальную форму этого уравнения.

$$\Delta \left[\frac{(3\pi^2)^{2/3}}{2} n^{2/3}(r) \right] = -4\pi [Z\delta(r) - n(r)]. \quad (5)$$

Так как выражение в правой части этого уравнения представляет объемную плотность заряда с множителем -4π , то величина $\frac{(3\pi^2 n)^{2/3}}{2}$ имеет смысл электростатического потенциала этого распределения заряда. Таким образом, уравнение (5) можно переписать в виде ($r \neq 0$)

$$\Delta\varphi = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \varphi^{3/2}, \quad \varphi = \frac{(3\pi^2 n)^{2/3}}{2},$$

совпадающем с уравнением Томаса — Ферми.

Отметим, что проведенное выше рассмотрение доказывает устойчивость нейтрального атома в модели Томаса — Ферми, так как решение уравнения (5) автоматически нормировано на Z : $\int n(r) dV = Z$, и отвечает минимальному значению энергии (3) системы. В то же время это означает, что статистическая модель не может объяснить существование устойчивых отрицательно заряженных ионов. Действительно, при нормировке $n(r)$ на большее чем Z значение, соответствующее отрицательно заряженным ионам, энергия системы будет больше, чем в случае нейтрального атома, что и означает неустойчивость такой системы («лишним» электронам в таком ионе энергетически выгоднее покинуть его).

Элементарное вычисление интегралов в выражении (3) с функцией $n_{\text{проб}}$, приведенной в условии задачи*), дает

$$E(\alpha) = \frac{81}{5000} (3\pi)^{2/3} Z^{5/3} \alpha^2 - \frac{11}{32} Z^2 \alpha$$

(по поводу вычисления интеграла U_{ee} см. 11.5). Минимизируя это выражение, легко находим приближенное вариационное значение энергии атома в модели Томаса — Ферми:

$$E_{\text{вар}} = \min E(\alpha) = -\frac{625 \cdot 121}{512 \cdot 81} (3\pi)^{-2/3} Z^{7/3} \approx -0,41 Z^{7/3} \text{ ат. ед.}, \quad (6)$$

которое полезно сравнить с точным значением $-0,77 Z^{7/3}$ из предыдущей задачи. Отметим, что довольно значительное раз-

*) Напомним: $n = \frac{32Z^2}{9\pi^3} \left[\frac{\chi(x)}{x} \right]^{3/2}$, $x = 2 \left(\frac{4}{3\pi} \right)^{2/3} Z^{1/3} r$.

личие приближенного вариационного значения (6) и точного объясняется тем обстоятельством, что использованная при расчете пробная функция $n_{\text{проб}}$ как при $r \rightarrow 0$, так и при $r \rightarrow \infty$ существенно отличается от точной функции $n(r)$, т. е. объясняется неудачным выбором пробной функции.

11.35. Обозначим через $n_0(r)$ истинную объемную плотность электронов в модели Томаса — Ферми для нейтрального атома. При этом энергия атома E_0 определяется формулой (3) предыдущей задачи, причем значение $E_0 = E[n_0(r)]$ является минимальным значением функционала $E[n(r)]$.

Изменение значения функционала $E[n(r)]$ при замене функции $n_0(r)$ на функцию вида $n(r) = (1 + \lambda)n_0(r)$ с $|\lambda| \ll 1$ равно

$$\delta E = E[n(r)] - E[n_0(r)] \approx \left(\frac{5}{3} T + 2U_{ee} + U_{e \text{ яд}} \right) \lambda,$$

где T , U_{ee} , $U_{e \text{ яд}}$ представляют кинетическую энергию электронов, энергию взаимодействия их друг с другом и энергию взаимодействия с ядром в модели Томаса — Ферми. Условие экстремальности функционала $E[n(r)]$, $\delta E = 0$, приводит к (ср. с 11.33)

$$5T + 6U_{ee} + 3U_{e \text{ яд}} = 0. \quad (1)$$

Аналогичным образом, рассмотрев преобразование вида $n(r) = n_0[(1 + \lambda)r]$ с $|\lambda| \ll 1$, легко приходим к соотношению

$$3T + 5U_{ee} + 2U_{e \text{ яд}} = 0. \quad (2)$$

Из установленных соотношений (1) и (2) доказательство утверждений задачи следует элементарно.

11.36. Для терма молекулярного иона водорода H_2^+ с квантовым числом Λ проекция орбитального момента электрона на направление оси, проходящей через ядра — протоны, может принимать лишь значения $m = \pm \Lambda$, и поэтому в. ф. такого терма могут быть представлены в виде

$$\Psi_m(r, \theta, \varphi) = \sum_{L \geq \Lambda} R_{L\Lambda}(r) Y_{Lm}(\theta, \varphi) = R(r, \theta) e^{im\varphi}, \quad (1)$$

где r , θ , φ — сферические координаты с полярной осью, направленной вдоль оси симметрии иона, и началом координат в центре отрезка, соединяющего ядра.

В случае Σ -термов ($m = \Lambda = 0$) в. ф. (1) при отражении координат электрона относительно плоскости, проходящей через ось симметрии иона (при этом преобразовании значения координат r , θ не изменяются), остается неизменной, т. е. Σ -состояния являются Σ^+ -термами (Σ^- -термов у системы H_2^+ нет).

В. ф. (1) терма должна быть с. ф. оператора отражения координат электрона относительно точки $r = 0$, коммутирующего с гамильтонианом системы. Так как при таком преобразовании координат $Y_{Lm} = (-1)^L Y_{Lm}$, то для термов с квантовыми

числами Λ_g (четные термы) сумма в (1) содержит только четные значения L , а для нечетных термов Λ_u — только нечетные значения L орбитального момента электрона.

Мультиплетность термов равна, очевидно, двум, и возможные термы:

$${}^2\Sigma_g^+, {}^2\Sigma_u^+, {}^2\Pi_g, {}^2\Pi_u, {}^2\Delta_g, {}^2\Delta_u, \dots$$

11.37. Пространственные части всех четырех в. ф. не изменяются при повороте системы электронов вокруг оси, параллельной вектору \mathbf{n}_0 *) и проходящей через точку $r=0$, и поэтому эти в. ф. описывают состояния с равной нулю проекцией суммарного орбитального момента электронов на указанную ось $m=0$, т. е. Σ -состояния.

Приведенные в. ф. имеют определенную четность по отношению к отражению координат электронов относительно точки $r=0$: в. ф. а) и в) являются четными (т. е. описывают Σ_g -состояния), а нечетные в. ф. б) и г) описывают Σ_u -состояния.

При отражении координат электронов относительно плоскости, проходящей через указанную выше ось, в. ф. а) и б) не изменяются, т. е. описывают Σ^+ -состояния, а меняющие знак в. ф. в) и г) отвечают Σ^- -состояниям.

Учитывая сказанное выше, имеем следующую классификацию рассматриваемых состояний:

$$а) \Sigma_g^+; б) \Sigma_u^+; в) \Sigma_g^-; г) \Sigma_u^-.$$

Мультиплетность состояний зависит от характера симметрии спиновой в. ф. $\chi_{\alpha\beta}$. Если $\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\beta\alpha}$, то система электронов имеет суммарный спин $S=1$ и, соответственно, мультиплетность равна $2S+1=3$ (при этом пространственная часть в. ф. согласно принципу Паули должна быть антисимметрична по отношению к перестановке пространственных переменных обоих электронов). В случае $\chi_{\alpha\beta} = -\chi_{\beta\alpha}$ имеем $S=0$ и мультиплетность равна 1.

11.38. Возможные термы: $2^2\Sigma_g^+, 2^2\Sigma_u^+, {}^2\Pi_g, {}^2\Pi_u$ (цифра 2 перед символами Σ -термов означает, что существуют два различных термина с соответствующими квантовыми числами).

11.39. Возможные термы:

- 1) N_2 ${}^{1,5}\Sigma_g^+, {}^{3,7}\Sigma_u^+$;
- 2) LiH ${}^{1,3}\Sigma^+$;
- 3) HCl ${}^{1,3}\Sigma^+, {}^{1,3}\Pi$;
- 4) NO ${}^{2,4,6}\Sigma^+, {}^{2,4,6}\Pi$

(при решении задачи следует учесть, что основные термы атомов N, Li, H, Cl, O — соответственно, ${}^4S_u, {}^2S_g, {}^2S_g, {}^2P_u, {}^3P_g$).

*) В двухатомных молекулах аналогом \mathbf{n}_0 является орт оси, проходящей через ядра.

11.40. Суммарная энергия двух атомов водорода равна $E = E_1 + E_2 = -1/2(n_1^{-2} + n_2^{-2})$. Если оба атома возбуждены, то $E \geq -1/4$, т. е. их энергия выше энергии, которую может иметь система, состоящая из атома водорода в основном состоянии и свободных протона и электрона. Поэтому при адиабатическом разведении ядер из термов молекулы H_2 не могут получиться два атома водорода, оба находящиеся в возбужденных состояниях.

11.41. Энергия, необходимая для возбуждения атома водорода, $E_{\text{возб}} \geq 0,375$ ат. ед., больше энергии связи электрона в атоме лития; поэтому в результате адиабатического разведения ядер из термов молекулы LiH не может получиться атом водорода, находящийся в возбужденном состоянии (возникающая при этом система нестабильна по отношению к процессу перехода электрона в атоме водорода в основное состояние с одновременной ионизацией атома лития).

11.42. Основным физическим обстоятельством в квантовой механике молекулы является малая величина отношения m/M , где m и M — массы электрона и ядер. Именно наличие этого малого параметра (порядка $10^{-4} \div 10^{-3}$) и обуславливает значительные различия порядков величин, перечисленных в условии задачи.

а) Обозначим через $a_{\text{ат}}$ порядок величины линейных размеров области локализации валентных (внешних) электронов в атоме. Такой же порядок величины имеют, очевидно, линейные размеры молекулы $a_{\text{мол}}$ и расстояния между ядрами в молекуле $a_{\text{яя}}$:

$$a_{\text{ат}} \sim a_{\text{мол}} \sim a_{\text{яя}} \sim a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Характерные значения энергий валентных электронов в атоме и в молекуле (как и разность соседних электронных уровней) равны по порядку величины $E_{\text{эл}} \sim \hbar^2/ma_0^2$. Характерные значения интервалов между колебательными и вращательными уровнями молекулы имеют порядок

$$E_{\text{кол}} \sim \hbar\omega_{\text{кол}} \sim \frac{\hbar^2}{ma_0^2} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} E_{\text{эл}},$$

$$E_{\text{вр}} \sim \frac{\hbar^2}{I} \sim \frac{\hbar^2}{Ma_0^2} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} E_{\text{кол}} \sim \frac{m}{M} E_{\text{эл}}$$

(колебательные уровни молекулы — уровни осциллятора с массой, равной приведенной массе ядер $M_{\text{прив}} \sim M$, и коэффициентом упругости k , порядок величины которого определяется соотношением $ka_0^2 \sim \frac{\hbar^2}{ma_0^2} \sim E_{\text{эл}}$; вращательные уровни молеку-

лы — уровни ротатора с моментом инерции $I \sim Ma_0^2$). Таким образом, $E_{\text{вр}} \ll E_{\text{кол}} \ll E_{\text{эл}}$.

б) Оценка величины $a_{\text{кол}}$ — амплитуды нулевых колебаний ядер — из соотношения $E_{\text{кол}} \sim ka_{\text{кол}}^2$ дает $a_{\text{кол}} \sim (m/M)^{1/4} a_0$.

в) Оценки характерных скоростей v и периодов T электронных и ядерных движений следуют из соотношений:

$$\begin{aligned} mv_{\text{эл}}^2 &\sim E_{\text{эл}}, \quad \text{т. е.} \quad v_{\text{эл}} \sim \hbar/ma_0, \quad T_{\text{эл}} \sim a_0/v_{\text{эл}} \sim ma_0^2/\hbar, \\ v_{\text{яд. кол}} &\sim \omega_{\text{кол}} a_{\text{кол}} \sim (m/M)^{3/4} \hbar/ma_0 \sim (m/M)^{3/4} v_{\text{эл}}, \\ v_{\text{яд. вр}} &\sim \sqrt{E_{\text{вр}}/M} \sim (m/M) \hbar/ma_0 \sim (m/M)^{1/4} v_{\text{яд. кол}} \sim \frac{m}{M} v_{\text{эл}}, \\ T_{\text{кол}} &\sim \omega_{\text{кол}}^{-1} \sim \left(\frac{M}{m}\right)^{1/2} \frac{ma_0^2}{\hbar} \sim \left(\frac{M}{m}\right)^{1/2} T_{\text{эл}}, \\ T_{\text{вр}} &\sim a_0/v_{\text{яд. вр}} \sim \frac{Ma_0^2}{\hbar} \sim \left(\frac{M}{m}\right)^{1/2} T_{\text{кол}} \sim \frac{M}{m} T_{\text{эл}}. \end{aligned}$$

Различные порядки характерных времен электронного, ядерного колебательного и ядерного вращательного движений в молекуле обуславливают применимость адиабатического приближения, согласно которому энергетические уровни молекулы представляются в виде $E = E_{\text{эл}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{вр}}$.

11.43. Энергия основного состояния молекулы равна

$$E_0 = E_{\text{эл}, 0} + E_{\text{кол}, 0} = E_0(R_0) + \hbar\omega_{\text{кол}}/2, \quad (1)$$

где $E_0(R)$ — энергия основного терма, R_0 — расстояние между ядрами в положении равновесия, $\omega_{\text{кол}} \equiv \omega_e = \sqrt{E''(R_0)/M}$, $M = M_1 \cdot M_2 / (M_1 + M_2)$ — приведенная масса ядер.

Ротационная постоянная молекулы равна $B_e = \hbar^2/2MR_0^2$.

Так как при замене ядер молекулы их изотопами зависимость $E_0(R)$ остается неизменной, то с учетом соотношения

$$\begin{aligned} m_d \approx 2m_p \quad \text{легко находим:} \quad (\hbar\omega_e)_{\text{HD}} &\approx \frac{\sqrt{3}}{2} (\hbar\omega_e)_{\text{H}_2} = 0,46 \text{ эВ}, \\ (\hbar\omega_e)_{\text{D}_2} &\approx \frac{1}{\sqrt{2}} (\hbar\omega_e)_{\text{H}_2} = 0,38 \text{ эВ}; \quad (B_e)_{\text{HD}} = \frac{3}{4} (B_e)_{\text{H}_2}, \quad (B_e)_{\text{D}_2} = \frac{1}{2} (B_e)_{\text{H}_2}. \end{aligned}$$

Энергия диссоциации молекулы определяется соотношением

$$I_0 = E_1^{(0)} + E_2^{(0)} - E_0, \quad (2)$$

где $E_{1,2}^{(0)}$ — энергии основных состояний соответствующих атомов. Учитывая значение энергии основного состояния атома водорода (с поправкой на конечное значение массы ядра $M_{\text{яд}}$ в первом порядке по малой величине $m_e/M_{\text{яд}}$; $m_e/m_p \approx 1/1840 \approx 5 \cdot 10^{-4}$)

$$E^{(0)} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \left(1 - \frac{m_e}{M_{\text{яд}}}\right) = -13,60 \left(1 - \frac{m_e}{M_{\text{яд}}}\right) \text{ эВ} \quad (3)$$

и численные параметры, приведенные в условии задачи, согласно формулам (1) — (3) легко находим

$$(I_0)_{\text{HD}} \approx 4,50 \text{ эВ}, \quad (I_0)_{\text{D}_2} \approx 4,54 \text{ эВ}.$$

Из приведенного решения следует, что эффект изотопического смещения уровней в атоме водорода имеет величину порядка $(\Delta E/E)_{\text{ат}} \sim m_e/m_p \sim 10^{-3}$, а в молекуле водорода $(\Delta E/E)_{\text{мол}} \sim \sqrt{m_e/m_p} \sim 1/40$. Изотопический эффект в молекуле наиболее ярко проявляется в изменении $\omega_{\text{кол}}$.

11.44. Ограничения на возможные значения орбитального момента K молекулы при фиксированном значении суммарного ядерного спина возникают по той причине, что волновая функция системы тождественных частиц (в данном случае ядерной подсистемы в молекулах H_2 и D_2) должна обладать определенной симметрией по отношению к перестановке переменных (спиновых и пространственных) любых двух частиц. Учитывая, что спиновая в. ф. системы двух спинов величины s при значениях суммарного спина $S = 2s, 2s - 2, \dots$, симметрична по отношению к перестановке спиновых переменных, а при $S = 2s - 1, 2s - 3, \dots$ антисимметрична (см. 3.39), и то обстоятельство, что протоны являются фермионами, а дейтроны — бозонами, заключаем, что при перестановке пространственных переменных ядер в. ф. молекулы H_2 при суммарном ядерном спине $S = 0$ и молекулы D_2 при $S = 0; 2$ не изменяются, а при $S = 1$ меняют знак. Выясним, к каким ограничениям на значения K приводит это обстоятельство.

В случае двухатомной молекулы с $\Lambda = 0$ ее вращательная в. ф. определяется только движением ядер. Это означает, что пространственная часть в. ф. молекулы в состоянии с суммарным значением K полного орбитального момента ядер и электронов и его проекции M на направление фиксированной оси z представляется в виде

$$\Psi = \Psi_{n, \Lambda=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}) \Psi_{\text{кол}}(|\mathbf{R}|) Y_{KM}(\theta, \varphi), \quad (1)$$

где Y_{KM} — шаровая функция; θ, φ — полярный и азимутальный углы относительного радиуса-вектора ядер $\mathbf{R} = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1$; $\Psi_{n, \Lambda=0}$ — в. ф. электронного Σ -терма; $\Psi_{\text{кол}}(|\mathbf{R}|)$ — в. ф., описывающая колебательное движение ядер.

Выясним поведение в. ф. (1) при перестановке пространственных переменных ядер, т. е. при преобразовании $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$. Очевидно, что при таком преобразовании колебательная часть в. ф. не изменяется, а шаровая функция умножается на $(-1)^K$. Более тонким является вопрос о преобразовании в. ф. терма $\Psi_{n, \Lambda=0}$. Эта в. ф. является скаляром (или псевдоскаляром, в зависимости от квантовых чисел терма), зависящим от векторов $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{R}$. Наиболее общий вид такой зависимости следующий:

$$\Psi_{n, \Lambda=0} = \Psi(r_1, r_2, R, \mathbf{r}_1\mathbf{R}, \mathbf{r}_2\mathbf{R}, \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2, [\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2] \mathbf{R}). \quad (2)$$

Рассмотрим преобразование в. ф. (2) при отражении координат электронов относительно плоскости, проходящей через вектор \mathbf{R} . При этом

$$\begin{aligned}\hat{P}_1\Psi_{n,\Lambda=0} &\equiv \Psi(r_1, r_2, R, \mathbf{r}_1\mathbf{R}, \mathbf{r}_2\mathbf{R}, \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2, -[\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]\mathbf{R}) = \\ &= \sigma_1\Psi(r_1, r_2, R, \mathbf{r}_1\mathbf{R}, \mathbf{r}_2\mathbf{R}, \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2, [\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]\mathbf{R}),\end{aligned}\quad (3)$$

где σ_1 равно $+1$ и -1 соответственно для положительных Σ^+ - и отрицательных Σ^- -термов.

Аналогично, при отражении координат электронов относительно центра отрезка, соединяющего ядра, имеем

$$\begin{aligned}\hat{P}_2\Psi_{n,\Lambda=0} &\equiv \Psi(r_1, r_2, R, -\mathbf{r}_1\mathbf{R}, -\mathbf{r}_2\mathbf{R}, \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2, [\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]\mathbf{R}) = \\ &= \sigma_2\Psi(r_1, r_2, R, \mathbf{r}_1\mathbf{R}, \mathbf{r}_2\mathbf{R}, \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2, [\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]\mathbf{R}),\end{aligned}\quad (4)$$

где σ_2 равно $+1$ для четных Σ_g и -1 для нечетных термов Σ_u .

Учитывая (2)–(4), легко заметить, что преобразование $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$ эквивалентно произведению преобразований, произведенных в выражениях (3) и (4), т. е. $\hat{P}(\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}) = \hat{P}_1\hat{P}_2$, так что $\hat{P}\Psi_{n,\Lambda=0} = \sigma_1\sigma_2\Psi_{n,\Lambda=0}$, и так как основной терм молекулы водорода Σ_g^+ , то в. ф. (1) при перестановке ядер умножается на $(-1)^K$.

Учитывая сказанное, заключаем, что у молекулы H_2 при суммарном ядерном спине $S = 0$ и у молекулы D_2 при $S = 0$; 2 возможны только четные значения орбитального момента $K = 0, 2, 4, \dots$, а при $S = 1$ у этих молекул возможны только нечетные значения K .

Возможные значения момента $K = 0, 1, 2, \dots$ молекулы HD не зависят от суммарного ядерного спина.

Подчеркнем то обстоятельство, что орбитальный момент ядер не совпадает со значением K момента молекулы (он даже не имеет определенного значения, как и орбитальный момент электронов!), однако возможные значения его по четности такие же, как и у K , т. е. $K, K \pm 2, K \pm 4, \dots$ *).

11.45. Для определенности найдем дипольный момент \mathbf{d} терма по отношению к точке, являющейся центром отрезка, соединяющего ядра (для нейтральной системы \mathbf{d} не зависит от того, по отношению к какой точке его определяют).

В случае молекулы, ядра которой имеют одинаковый заряд (т. е. являются тождественными или же различными изотопами некоторого элемента), среднее значение \mathbf{d} системы равно нулю. Доказательство этого утверждения аналогично проведенному

*) Напомним, что этот результат получен для молекул, электронный терм которых Σ_g^+ . Легко заметить, что он сохраняется и для терма Σ_u^- . В случае термов Σ_u^+ и Σ_g^- связь возможных значений орбитального момента ядер с орбитальным моментом молекулы K уже другая: $K \pm 1, K \pm 3, \dots$

при решении задачи 1.21 с учетом того, что в. ф. электронного термина имеет определенную четность.

В случае молекулы, ядра которой имеют различные заряды, среднее значение $\bar{\mathbf{d}}$ в состоянии электронного термина с определенным значением проекции орбитального момента электронов на ось симметрии отлично от нуля, причем вектор $\bar{\mathbf{d}}$ направлен вдоль оси симметрии, а его значение не зависит от знака проекции орбитального момента электронов $m = \pm \Lambda$. Однако в стационарных состояниях молекулы, имеющих определенную четность, среднее значение дипольного момента равно нулю (в случае Σ -термов равенство $\bar{\mathbf{d}} = 0$ для молекулы очевидным образом следует из усреднения среднего дипольного момента термина $d\mathbf{n}_0$ по вращательной в. ф.).

11.46. Среднее значение оператора Гамильтона

$$\hat{H}_{э.л} = -\frac{1}{2} \Delta - \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} - \frac{1}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} + \frac{1}{R}$$

в состоянии, описываемом в. ф. $\Psi_{\text{проб}}(r)$, равно

$$E_0(R, \alpha) = \bar{H}_{э.л} = \frac{\alpha^2}{2R^2} - \frac{1}{R} [3 - 2(2 + \alpha)e^{-\alpha}] \quad (1)$$

(учитывая, что пробная функция имеет вид «водородной» функции, для средних \bar{T} и $\overline{|\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2|^{-1}}$ можно использовать хорошо известные значения; в частности, $\overline{|\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2|^{-1}}$ определяется формулой (5) задачи 4.29, если в ней положить $r = R/2$, $a = R/\alpha$, $e = 1$ и вычесть слагаемое $2/R$, описывающее потенциал ядра, так что

$$\overline{|\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2|^{-1}} = -[2 - (2 + \alpha)e^{-\alpha}]/R.$$

Выражение (1) в соответствии с общей идеей вариационного метода можно рассматривать как некоторое приближенное значение истинной энергии $E_0(R)$ основного термина, причем наилучшее приближение получается при таком выборе параметра α , при котором это выражение принимает минимальное значение (как функция переменной α , значение $\alpha(R)$ определяется условием $\partial E_0(R, \alpha)/\partial \alpha = 0$ и является функцией переменной R). Ограничившись указанным в условии задачи значением $\alpha = 1,9$, имеем согласно (1) приближенное выражение для энергии основного термина иона H_2^+ вида

$$E_0(R) = \frac{1,80}{R^2} - \frac{1,83}{R}. \quad (2)$$

С помощью (2) находим искомые характеристики термина: $R_0 = 1,97$ ат. ед. (из условия $\partial E_0(R_0)/\partial R = 0$), $E_0 \equiv E_0(R_0) = -0,47$ ат. ед., $E_{\text{кол},0} = \frac{\omega_e}{2} = \frac{1}{2} \sqrt{E_0''(R_0)(2m_e/m_p)} = 0,008$ ат. ед.

В рассматриваемом приближении значение $E_0 = -0,47$ ат. ед. выше энергии основного состояния атома водорода, равной $-0,50$ ат. ед., и нельзя сделать вывод о существовании устойчивого иона. Значительное расхождение рассчитанного и экспериментального значений энергии нулевых колебаний ядер — протонов легко объяснить тем обстоятельством, что при расчетах не производилось варьирование параметра α и поэтому график зависимости $E_0(R)$ из выражения (2) вблизи точки минимума R_0 идет вверх более круто, чем график более точной зависимости, получаемой из (1) при варьировании α . Это приводит к завышенному значению величины $E_0''(R_0)$, а с нею и энергии нулевых колебаний.

11.47. Условия $l_1 = 1$ и $\Lambda = 0$ однозначно определяют зависимость в. ф. от угловых переменных первой частицы вида

$$\Psi \propto (\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) \quad (\mathbf{n}_1 = \mathbf{r}_1/r_1, \quad \mathbf{n}_2 = \mathbf{r}_2/r_2) \quad (1)$$

(следует учесть, что проекция суммарного момента на направление радиуса-вектора второй частицы определяется проекцией момента только первой из частиц, так как $\hat{l}_2 \mathbf{n}_2 \equiv 0$).

В. ф. (1) является скаляром, поэтому она определяет в. ф. состояния с моментом (суммарным), равным нулю, так что $\Psi_{000} = \text{const}(\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2)$.

В. ф. состояния с моментом $J = 1$ представляют линейную комбинацию компонент вектора, зависящего только от векторов \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 . Так как зависимость в. ф. от вектора \mathbf{n}_1 определяется только множителем, приведенным в выражении (1), то требуемый вектор можно получить единственным образом:

$$\mathbf{v} = A(\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) \mathbf{n}_2. \quad (2)$$

Составляя из компонент вектора (2) линейные комбинации, отвечающие состояниям с определенными значениями величин $J = 1, J_z$, согласно общим принципам (см. задачи § 4 главы 3) находим искомые в. ф.:

$$\Psi_{1J_z^0} = A(\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) Y_{1J_z}(\theta_2, \varphi_2)$$

(Y_{lm} — шаровые функции).

Обобщение на случай произвольных значений l_1, J, J_z , как нетрудно сообразить, имеет вид

$$\Psi_{JJ_z^0} = A P_{l_1}(\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2) Y_{JJ_z}(\theta_2, \varphi_2),$$

где $P_l(z)$ — полином Лежандра.

11.48. Рассмотрим в. ф. вида $\Psi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. В таком состоянии, очевидно, суммарный момент J и его проекция имеют определенные значения $J = 1/2$ и $J_z = 1/2$ (так как $l = 0$). Подействуем на указанную функцию оператором $\hat{P}_+ = 1/2(\hat{\sigma} \mathbf{n} + 1)$, где $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Оператор $\hat{\sigma} \mathbf{n}$ является опера-

тором псевдоскалярной величины, и поэтому он, как и оператор \hat{P}_+ , коммутирует с операторами \hat{J}^2 и J_z . Следствием этой коммутативности является то обстоятельство, что функция вида

$$\Psi_{1/2, 1/2, 1/2} \equiv \hat{P}_+ \Psi_0 = 1/2(1 + \hat{\sigma}\mathbf{n}) \Psi_0 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

как и функция Ψ_0 , описывает состояние с определенными значениями $J = 1/2$, $J_z = 1/2$; кроме того, в. ф. (1) является с. ф. оператора $1/2 \hat{\sigma}\mathbf{n} \equiv \hat{\lambda}$ — проекции спина частицы на направление ее радиуса-вектора, отвечающей с. з. $\lambda = +1/2$. Таким образом, в. ф. (1) является одной из искомым функций. Аналогично, воспользовавшись оператором $\hat{P}_- = 1/2(1 - \hat{\sigma}\mathbf{n})$, можно найти в. ф. $\Psi_{1/2, 1/2, -1/2}$, а взяв вместо функции Ψ_0 функцию $\tilde{\Psi}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, можно найти искомые в. ф. с $J_z = -1/2$.

В. ф. $\Psi_{1/2, J_z, \lambda}$ отвечают состояниям, не имеющим определенной четности (орбитальный момент в таких состояниях может принимать два значения: $l = 0$ и $l = 1$). Легко сообразить, что в результате действия оператора отражения координат \hat{I} эти функции преобразуются следующим образом: $\hat{I}\Psi_{1/2, J_z, \lambda} = \Psi_{1/2, J_z, -\lambda}$.

11.49. Учитывая известные соображения о свойствах с. ф. гамильтониана асимметричного волчка:

а) характер их симметрии по отношению к преобразованию отражения относительно плоскости, проходящей через ось ξ (ось ξ — третья ось системы координат, жестко связанной с волчком; проекция k момента волчка на эту ось входит в полный набор величин J, J_z, k , определяющих в. ф. волчка $\Psi_{JJ_z k}$); при этом преобразовании J, J_z не изменяются, а величина k меняет знак;

б) то обстоятельство, что в суперпозициях в. ф. $\Psi_{JJ_z k}$, представляющих с. ф. гамильтониана $\Psi_E = \sum_k c_k \Psi_{JJ_z k}$, представлены в. ф. со значениями k , имеющими определенную четность (либо все k — четные, либо — нечетные);

в) то обстоятельство, что с. ф. гамильтониана могут быть выбраны также с. ф. оператора проекции момента на ось z , причем с. з. гамильтониана не зависят от J_z ,

заключаем, что при $J = 1$ с. ф. имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_{E_1 J_z}^{(1)} &= \Psi_{1J_z 0}, & \Psi_{E_2 J_z}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{1J_z 1} + \Psi_{1J_z, -1}), \\ \Psi_{E_3 J_z}^{(3)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{1J_z 1} - \Psi_{1J_z, -1}). \end{aligned} \quad (1)$$

С. з. гамильтониана волчка $\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\hat{J}_\xi^2}{I_1} + \frac{\hat{J}_\eta^2}{I_2} + \frac{\hat{J}_\zeta^2}{I_3} \right)$, соответствующие с. ф. (1), легко найти, если воспользоваться

известными значениями отличных от нуля матричных элементов операторов \hat{J}_ξ и \hat{J}_η :

$$\begin{aligned}\langle J, J_z, k+1 | \hat{J}_\xi | J, J_z, k \rangle &= \langle J, J_z, k | \hat{J}_\xi | J, J_z, k+1 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{(J-k)(J+k+1)}, \\ \langle J, J_z, k+1 | \hat{J}_\eta | J, J_z, k \rangle &= -\langle J, J_z, k | \hat{J}_\eta | J, J_z, k+1 \rangle = \\ &= \frac{i}{2} \sqrt{(J-k)(J+k+1)}.\end{aligned}\quad (2)$$

Следствием соотношений (2) при $J=1$ являются равенства

$$\begin{aligned}\hat{J}_\xi^2 \Psi^{(1)} &= \hat{J}_\eta^2 \Psi^{(1)} = \Psi^{(1)}, & \hat{J}_\xi^2 \Psi^{(2)} &= \Psi^{(2)}, \\ \hat{J}_\xi^2 \Psi^{(3)} &= 0, & \hat{J}_\eta^2 \Psi^{(2)} &= 0, & \hat{J}_\eta^2 \Psi^{(3)} &= \Psi^{(3)}.\end{aligned}\quad (3)$$

Используя равенства (3), легко находим три с. з. гамильтониана E_a ($a=1, 2, 3$), отвечающие с. ф. $\Psi_{E_a, J_z}^{(a)}$:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_2} \right), \quad E_2 = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_3} \right), \quad E_3 = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{I_2} + \frac{1}{I_3} \right)$$

(каждое из этих с. з. является трехкратно вырожденным по величине J_z , так как $J_z = 0, \pm 1$).

Вид с. ф. гамильтониана в $J_z J_\xi$ -представлении очевиден.

11.50. Представим гамильтониан волчка в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2 \hat{J}_\xi^2}{2I_3}, \quad \hat{V} = \frac{\hbar^2 \hat{J}_\xi^2}{2I_1} + \frac{\hbar^2 \hat{J}_\eta^2}{2I_2}.$$

С. з. и с. ф. гамильтониана \hat{H}_0 , описывающего симметричный волчок с $I_1 = I_2 = \infty$, хорошо известны:

$$E_k^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2I_3}, \quad \Psi_{\pm k}^{(0)} = \Psi_{J_z \pm k}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, J,$$

причем основной уровень ($k=0$) является невырожденным*), а все возбужденные — двукратно вырождены. Учитывая, что правильными с. ф. нулевого приближения являются комбинации

$$\Psi_{J_z k, 1}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{J_z k} + \Psi_{J_z -k}), \quad \Psi_{J_z k, 2}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{J_z k} - \Psi_{J_z -k})$$

(см. предыдущую задачу: свойство б) с. ф. гамильтониана волчка), сдвиги энергетических уровней можно рассчитывать по формулам теории возмущений без вырождения. Простое вычисление с использованием известных значений матричных элементов операторов \hat{J}_ξ и \hat{J}_η (они приведены в предыдущей

*) Мы отвлекаемся от $(2J+1)$ -кратного вырождения уровней волчка по величине J_z .

задаче) дает:

$$E_{k,1}^{(1)} = E_{k,2}^{(1)} = 0 \text{ при } k \geq 2,$$

$$E_0^{(1)} = \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_2} \right), \quad E_{1,1}^{(1)} = \frac{\hbar^2}{8} \left[\frac{3J(J+1)-2}{I_1} + \frac{J(J+1)-2}{I_2} \right],$$

$$E_{1,2}^{(1)} = \frac{\hbar^2}{8} \left[\frac{J(J+1)-2}{I_1} + \frac{3J(J+1)-2}{I_2} \right],$$

т. е. в первом порядке теории возмущений происходит сдвиг основного и первого возбужденного уровней волчка, причем двукратно вырожденный возбужденный уровень расщепляется на два подуровня (вырождение снимается при $I_1 \neq I_2$). Внимательный читатель сообразит, что сдвиг и расщепление (при $I_1 \neq I_2$) уровня $E_k^{(0)}$ с $k \neq 0$ происходят в k -м порядке теории возмущений и, соответственно, чем больше значение k , тем меньше величина расщепления. Это обстоятельство проясняет картину энергетического спектра асимметричного волчка в случае $I_1 \sim I_2 \gg I_3$.

11.51. Представив гамильтониан волчка в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где

$$\hat{H}_0 = a (\hat{J}_\xi^2 + \hat{J}_\eta^2) + b J_\xi^2, \quad \hat{V} = c (\hat{J}_\xi^2 - \hat{J}_\eta^2),$$

$$a = \frac{\hbar^2 (I_1 + I_2)}{4I_1 I_2}, \quad c = \frac{\hbar^2 (I_2 - I_1)}{4I_1 I_2}, \quad b = \frac{\hbar^2}{2I_3}, \quad a \sim b \gg |c|,$$

решение задачи легко получить по образцу предыдущей. Приведем ответ:

$$E_k^{(0)} = aJ(J+1) + (b-a)k^2, \quad k = 0, 1, \dots, J,$$

$$E_0^{(1)} = 0; \quad E_{k,1}^{(1)} = E_{k,2}^{(1)} = 0 \text{ при } k \geq 2,$$

$$E_{1,1}^{(1)} = \frac{cJ(J+1)}{2}, \quad E_{1,2}^{(1)} = -\frac{cJ(J+1)}{2}$$

(вид с. ф. гамильтониана в нулевом приближении и характер энергетического спектра волчка такие же, как и в предыдущей задаче).

11.52. Указанное ограничение на значение величины β_0 следует из цепочки соотношений:

$$\sum_k' (E_k - E_0)^{-1} |\langle k | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2 < (E_1 - E_0)^{-1} \sum_k' |\langle k | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2 \equiv$$

$$\equiv (E_1 - E_0)^{-1} \left\{ \sum_k |\langle k | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2 - |\langle 0 | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2 \right\} \equiv$$

$$\equiv (E_1 - E_0)^{-1} \sum_k \langle 0 | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | k \rangle \langle k | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle = (E_1 - E_0)^{-1} \langle 0 | (\hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0)^2 | 0 \rangle \quad (1)$$

(мы воспользовались условием полноты $\sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{1}$ и учли, что $\langle 0 | \hat{d}_i | 0 \rangle = 0$), если учесть соотношение

$$\langle 0 | \hat{d}_i \hat{d}_k | 0 \rangle \equiv e^2 \sum_{a,b} \langle 0 | x_{ai} x_{bk} | 0 \rangle = C \delta_{ik}, \quad (2)$$

в котором значение величины

$$C = \frac{e^2}{3} \sum_{a,b} \langle 0 | (\mathbf{r}_a \mathbf{r}_b) | 0 \rangle$$

получается сверткой по индексам i и k .

Ограничение снизу на величину β_0 можно получить, если удержать в выражении для β_0 лишь одно слагаемое суммы, отвечающее первому возбужденному состоянию:

$$\beta_0 > 2(E_1 - E_0)^{-1} |\langle 1 | \hat{\mathbf{d}}_{\mathbf{n}_0} | 0 \rangle|^2.$$

Подчеркнем, что под первым возбужденным состоянием следует понимать не просто первое по счету возбужденное состояние системы, а первое возбужденное состояние, для которого $\langle 1 | \hat{d}_i | 0 \rangle \neq 0$. Так как в основном состоянии $J = 0$, то, учитывая известные значения матричных элементов векторов, заключаем, что такое состояние имеет $J = 1$ и противоположную по отношению к основному состоянию четность (E_1 представляет энергию нижнего уровня с такими квантовыми числами). Далее, если выбрать ось z направленной вдоль вектора \mathbf{n}_0 , то в матричном элементе $\langle 1 | \hat{\mathbf{d}}_{\mathbf{n}_0} | 0 \rangle$ состояние $|1\rangle$ должно отвечать определенной проекции момента: $J_z = 0$ (при $J_z = \pm 1$ такие матричные элементы равны нулю).

В случае атома водорода установленные ограничения на величину β_0 принимают вид

$$\frac{2e^2 |\langle 210 | z | 100 \rangle|^2}{E_{n=2} - E_{n=1}} < \beta_0 < \frac{2e^2 \langle 100 | r^2 | 100 \rangle}{3(E_{n=2} - E_{n=1})}. \quad (3)$$

Учитывая известный вид в. ф. состояний $|nlm\rangle$ атома водорода, находим в результате элементарного интегрирования

$$\langle 100 | r^2 | 100 \rangle = 3a_0^2, \quad |\langle 210 | z | 100 \rangle| = 4\sqrt{2} (2/3)^5 a_0,$$

и неравенства (3) принимают вид

$$2,96a_0^3 = \frac{8}{3} \left(\frac{256}{243}\right)^2 a_0^3 < \beta_0 < \frac{16}{3} a_0^3 = 5,33a_0^3. \quad (4)$$

11.53. Уточнение ограничения снизу на величину β_0 можно произвести, оставив в сумме, определяющей β_0 , два слагаемых. Учитывая ограничения на квантовые числа состояний $|k\rangle$ в этой сумме, сформулированные в предыдущей задаче, заключаем, что в случае атома водорода во втором отличном от нуля слагаемом фигурирует состояние $|n=3, l=1, m=0\rangle$ и, та-

ким образом,

$$\beta_0 > \frac{2e^2 |\langle 210 | z | 100 \rangle|^2}{E_{n=2} - E_{n=1}} + \frac{2e^2 |\langle 310 | z | 100 \rangle|^2}{E_{n=3} - E_{n=1}}. \quad (1)$$

Уточнение ограничения сверху можно произвести, проделав следующее преобразование суммы, определяющей β_0 :

$$\sum_k' \frac{|\langle k | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2}{E_k - E_0} < \frac{|\langle 1 | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2}{E_1 - E_0} + \frac{1}{E_2 - E_0} \sum_k'' |\langle k | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2, \quad (2)$$

и выполнив суммирование в правой части этого неравенства способом, аналогичным использованному в предыдущей задаче:

$$\begin{aligned} \sum_k'' |\langle k | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2 &= \sum_k |\langle k | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2 - \\ &- |\langle 1 | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2 = \frac{1}{3} \langle 0 | \hat{\mathbf{d}}^2 | 0 \rangle - |\langle 1 | \hat{\mathbf{d}}\mathbf{n}_0 | 0 \rangle|^2. \end{aligned} \quad (3)$$

С учетом соотношений (2) и (3) получаем искомое ограничение сверху, которое применительно к атому водорода принимает вид

$$\begin{aligned} \beta_0 < \frac{2e^2 \langle 100 | r^2 | 100 \rangle}{3(E_{n=3} - E_{n=1})} + \\ + \left(\frac{2}{E_{n=2} - E_{n=1}} - \frac{2}{E_{n=3} - E_{n=1}} \right) |\langle 210 | ez | 100 \rangle|^2. \end{aligned} \quad (4)$$

Элементарное интегрирование дает $|\langle 310 | z | 100 \rangle| = \frac{a_0}{\sqrt{2}} (3/4)^3$.

Учитывая также значения других матричных элементов, приведенные в предыдущей задаче, согласно (1) и (4) находим $3,36a_0^3 < \beta_0 < 4,96a_0^3$.

11.54. а) Перепишем пробную в. ф. в виде $\Psi_{\text{проб}} = C(\Psi_0 + \gamma \mathcal{E}_0 \Psi_1)$, где в. ф.

$$\Psi_1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} r e^{-r}$$

нормирована на единицу, как и в. ф. Ψ_0 , γ — вариационный параметр (мы используем атомные единицы). Нормировка в. ф. $\Psi_{\text{проб}}$ с учетом ортогональности функций Ψ_0 и Ψ_1 приводит к значению $C^2 = (1 + \gamma^2 \mathcal{E}_0^2)^{-1} \approx 1 - \gamma^2 \mathcal{E}_0^2$.

Среднее значение гамильтониана системы

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \Delta - \frac{1}{r} + \mathcal{E}_0 z \equiv \hat{H}_0 + \mathcal{E}_0 r \cos \theta \quad (1)$$

в состоянии, описываемом в. ф. $\Psi_{\text{проб}}$, легко найти, если воспользоваться очевидными соотношениями

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{H}_0 | \Psi_0 \rangle &= -1/2, \\ \langle \Psi_1 | \hat{H}_0 | \Psi_0 \rangle &= \langle \Psi_0 | \hat{H}_0 | \Psi_1 \rangle = -1/2 \langle \Psi_1 | \Psi_0 \rangle = 0 \end{aligned}$$

и заметить, что в. ф. Ψ_1 представляет в. ф. состояния с квантовыми числами $n=2$, $l=1$, $m=0$ водородоподобного атома с зарядом ядра $Z=2$ и поэтому удовлетворяет уравнению

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{2}{r}\right)\Psi_1 = -\frac{Z^2}{2n^2}\Psi_1 = -\frac{1}{2}\Psi_1.$$

Соответственно

$$\langle\Psi_1|\hat{H}_0|\Psi_1\rangle = \langle\Psi_1|-\frac{1}{2}\Delta - \frac{2}{r} + \frac{1}{r}|\Psi_1\rangle = -\frac{1}{2} + \langle\Psi_1|\frac{1}{r}|\Psi_1\rangle = 0$$

(значение $\langle\Psi_1|1/r|\Psi_1\rangle = -1/2\langle\Psi_1|-2/r|\Psi_1\rangle = 1/2$ непосредственно следует из теоремы вириала). Учитывая также соотношения

$$\langle\Psi_1|z|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|z|\Psi_1\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi^2}} \frac{2}{\sqrt{3}} \int e^{-2r^2} \cos^2\theta r^2 dr d\Omega = 1,$$

$$\langle\Psi_0|z|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_1|z|\Psi_1\rangle = 0,$$

получаем

$$\begin{aligned} \bar{E}(\gamma) = \bar{H} = C^2 \langle\Psi_0|\hat{H}_0|\Psi_0\rangle - 2\mathcal{E}_0^2 \gamma C^2 \langle\Psi_1|z|\Psi_0\rangle \approx \\ \approx -1/2 + \gamma^2 \mathcal{E}_0^2 / 2 + 2\gamma \mathcal{E}_0^2 \end{aligned} \quad (2)$$

(учитывая предполагаемую малость электрического поля, в выражении (2) оставляем лишь слагаемые с наименьшей степенью величины \mathcal{E}_0).

Минимизируя $\bar{E}(\gamma)$ по параметру γ , легко находим

$$E_{0\text{ вар}} = \min \bar{E}(\gamma) = \bar{E}(\gamma_0) = -1/2 - 2\mathcal{E}_0^2 \quad (\gamma_0 = -2). \quad (3)$$

Полученное выражение (3) представляет приближенное значение энергии основного состояния атома водорода, находящегося в слабом электрическом поле. Сравнивая его с точным значением, равным $-1/2 - 1/2\beta_0\mathcal{E}_0^2$, где β_0 — поляризуемость основного состояния, находим приближенное (вариационное) значение этой величины $\beta_{\text{вар}} = 4$.

б) Учитывая ортогональность в. ф. Ψ_0 и Ψ_1 , находим из условия нормировки в. ф. $\Psi_{\text{проб}}$ значение $C^2 = (1 + \alpha^2 \mathcal{E}_0^2)^{-1} \approx 1 - \alpha^2 \mathcal{E}_0^2$. Используя значения следующих матричных элементов:

$$\langle\Psi_0|\hat{H}_0|\Psi_0\rangle = -1/2, \quad \langle\Psi_1|\hat{H}_0|\Psi_1\rangle = -1/8,$$

$$\langle\Psi_1|\hat{H}_0|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|\hat{H}_0|\Psi_1\rangle = 0, \quad \langle\Psi_1|z|\Psi_1\rangle = \langle\Psi_0|z|\Psi_0\rangle = 0,$$

$$\langle\Psi_1|z|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|z|\Psi_1\rangle =$$

$$= \sqrt{\frac{3}{4\pi^2}} \frac{1}{2\sqrt{6}} \int e^{-3r^2/2} \cos^2\theta r^2 dr d\Omega = 4\sqrt{2} \left(\frac{2}{3}\right)^5 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{256}{243},$$

легко находим

$$\bar{E}(\alpha) = \bar{H} \approx -\frac{1}{2} + \frac{3}{8} \alpha^2 \mathcal{E}_0^2 + \sqrt{2} \frac{256}{243} \alpha \mathcal{E}_0^2. \quad (4)$$

Минимизируя это выражение, получаем $E_{0 \text{ вар}} = \min \bar{E}(\alpha) = -\frac{1}{2} - \frac{4}{3} \left(\frac{256}{243}\right)^2 \mathcal{E}_0^2$, откуда следует искомое приближенное значение поляризуемости основного состояния атома водорода $\beta_{\text{вар}} = \frac{8}{3} \left(\frac{256}{243}\right)^2 \approx 2,96$.

Используя различный вид пробных в. ф., мы нашли два различных значения поляризуемости. Так как в обоих случаях вариационное значение энергии основного состояния при $\mathcal{E}_0 \rightarrow 0$ оказалось равным $E_0 = -1/2 - 1/2 \beta_{\text{вар}} \mathcal{E}_0^2$, то, учитывая то обстоятельство, что вариационное значение E_0 не ниже точного и что энергия основного состояния равна $E_0 = -1/2 - 1/2 \beta_0 \mathcal{E}_0^2$, можно утверждать, что полученные значения $\beta_{\text{вар}}$ меньше точного. Таким образом, даже не зная точного значения $\beta_0 = 9/2$, заранее можно было утверждать, что первое значение $\beta_{\text{вар}} = 4$ более близко к точному.

11.55. Простое вычисление, аналогичное проведенному в пункте а) предыдущей задачи, дает

$$\bar{E} = -\frac{1}{2} + \frac{1-\gamma+\gamma^2}{2} \alpha^2 \mathcal{E}_0^2 + \frac{64\gamma^{5/2}}{(1+\gamma)^5} \alpha \mathcal{E}_0^2$$

(при этом следует учесть, что в. ф. Ψ_1 является с. ф. гамильтониана водородоподобного атома с зарядом ядра $Z = 2\gamma$, описывающей состояние с $n = 2, l = 1, m = 0$).

Минимизируя это значение \bar{E} по параметрам α и γ , можно найти наиболее точное (на данном классе в. ф. $\Psi_{\text{проб}}$) вариационное значение энергии основного состояния: $E_{0 \text{ вар}} = \min \bar{E}$. Минимизация по параметру α (соответствующее значение α_0 легко определяется из условия $d\bar{E}/d\alpha = 0$) дает

$$\bar{E} = -\frac{1}{2} - \frac{2^{11}\gamma^5}{(1+\gamma)^{10}(1-\gamma+\gamma^2)} \mathcal{E}_0^2.$$

Минимизируя это значение по параметру γ , находим $E_{0 \text{ вар}}$, а с ним и искомое вариационное значение $\beta_{\text{вар}}$ поляризуемости:

$$\beta_{\text{вар}} = \frac{2^{12}\gamma_0^5}{(1+\gamma_0)^{10}(1-\gamma_0+\gamma_0^2)}.$$

Оптимальное значение γ_0 получается из условия $d\bar{E}/d\gamma = 0$, представляющего, как легко убедиться, алгебраическое уравнение третьей степени относительно параметра γ ; это дает $\gamma_0 \approx 0,8$ (два других корня — комплексные).

Таким образом, находим $\beta_{\text{вар}} = 4,475$ ат. ед., т. е. значение, отличающееся от точного на 0,6%.

11.56. Перенумеруем с. ф. гамильтониана Ψ_{nlm} с $n = 2$ следующим образом:

$$\Psi_1 = \Psi_{200}, \quad \Psi_2 = \Psi_{210}, \quad \Psi_3 = \Psi_{211}, \quad \Psi_4 = \Psi_{21,-1}, \quad \Psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm},$$

$$R_{20} = (2a_0^3)^{-1/2} e^{-r/2a_0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right), \quad R_{21} = (24a_0^5)^{-1/2} r e^{-r/2a_0},$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}.$$

Значения поправок первого порядка к невозмущенному четырехкратно вырожденному (без учета спина электрона) уровню атома водорода с $n = 2$ за счет возмущения $\mathcal{V} = e\mathcal{E}_0 z = er \cos \theta \mathcal{E}_0$ определяются из решения секулярного уравнения $V_{ik} - E_2^{(1)} \delta_{ik} = 0$. Легко заметить, что отличны от нуля только следующие матричные элементы возмущения:

$$V_{12} = -V_{21} = i \frac{e\mathcal{E}_0}{16\pi a_0^4} \int e^{-r/a_0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) r^2 \cos^2 \theta r^2 dr d\Omega = -3iea_0 \mathcal{E}_0,$$

и поэтому секулярное уравнение и его решение принимают вид

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & -3iea_0 \mathcal{E}_0 & 0 & 0 \\ 3iea_0 \mathcal{E}_0 & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = E_2^{(1)2} (E_2^{(1)2} - 9e^2 a_0^2 \mathcal{E}_0^2) = 0,$$

$$E_{2,1}^{(1)} = 3ea_0 \mathcal{E}_0, \quad E_{2,2}^{(1)} = -3ea_0 \mathcal{E}_0, \quad E_{2,3}^{(1)} = E_{2,4}^{(1)} = 0, \quad (1)$$

т. е. уровень расщепляется на три подуровня, из которых два являются невырожденными, а один — двукратно вырожденным (с учетом спина электрона эти кратности вырождения удваиваются).

Условия применимости полученных результатов (1) имеют вид

$$5 \cdot 10^{-5} \text{ эВ} \ll 6ea_0 \mathcal{E}_0 \ll 3 \text{ эВ}, \quad \text{или} \quad 2 \cdot 10^3 \text{ В/см} \ll \mathcal{E}_0 \ll 10^8 \text{ В/см}$$

(штарковское расщепление должно быть много большим интервала тонкой структуры, но много меньшим разности энергетических уровней невозмущенного атома водорода).

11.57. В случае атома водорода, находящегося в однородном электрическом поле, гамильтониан и энергия основного состояния имеют вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}z, \quad E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(2)} \quad (E_0^{(1)} = 0),$$

где $E_0^{(0)}$ — энергия невозмущенного атома, $E_0^{(2)} = -1/2 \beta_0 \mathcal{E}^2$ — поправка второго порядка теории возмущений по «слабому»

полю \mathcal{E} , определяющая поляризуемость атома водорода $\beta_0 = = 9/2 (\hbar^2/me^2)^3$.

В случае гамильтониана (водородоподобный атом в электрическом поле)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + e\mathcal{E}z \quad (1)$$

энергия основного уровня может быть получена из приведенных выше выражений формальной заменой $e \rightarrow \sqrt{Z}e$, $\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E}/\sqrt{Z}$; в частности,

$$E_0^{(2)} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{9}{2} \left(\frac{\hbar^2}{Zme^2} \right)^3 \frac{\mathcal{E}^2}{Z} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{9a_0^3}{2Z^4} \mathcal{E}^2,$$

т. е. поляризуемость такого атома равна $\beta = 9a_0^3/2Z^4$.

Гамильтониан гелиеподобного атома с зарядом ядра Z в электрическом поле в пренебрежении взаимодействием между электронами равен $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, где $\hat{H}_{1,2}$ — гамильтонианы отдельных электронов, имеющие вид (1). Очевидно, энергия и поляризуемость основного состояния такой системы получаются умножением на 2 соответствующих величин для водородоподобного атома с тем же зарядом ядра Z . Таким образом,

$$\beta_{\text{He}} = \frac{9a_0^3}{Z^4} = 9Z^{-4} \text{ ат. ед.} \quad (2)$$

При $Z = 2$ и $Z = 27/16$, соответствующих приближениям *a*) и *б*), сформулированным в условии задачи, согласно (2) находим следующие значения поляризуемости атома гелия:

$$a) \beta = 0,56a_0^3 = 0,56 \text{ ат. ед.}; \quad б) \beta = 1,11 \text{ ат. ед.}$$

Диэлектрическая проницаемость гелия (одноатомный газ) при нормальных условиях равна $\epsilon_0 = 1 + 4\pi\beta n_0$, где $n_0 = = 2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$; так как $a_0^3 = 1,49 \cdot 10^{-25} \text{ см}^3$, то $\epsilon_0 = 1 + 5,0 \cdot 10^{-5} \beta$ (β в ат. ед.). Таким образом: *a*) $\epsilon_0 = 1,000028$; *б*) $\epsilon_0 = = 1,000056$.

11.58. Для оценки поляризуемости томас-фермиевских (т.-ф.) электронов $\beta_{\text{т.-ф}}$, определяющей их индуцированный дипольный момент $\mathbf{d} = \beta_{\text{т.-ф}} \mathcal{E}$, замечаем, что, хотя приведенное соотношение строго справедливо лишь при достаточно малых значениях \mathcal{E} , оно все же дает правильный порядок величины d и в случае сильных полей. Но при $\mathcal{E} \sim \mathcal{E}_{\text{т.-ф}}$ ($\mathcal{E}_{\text{т.-ф}}$ — характерное значение напряженности поля в области, где в основном локализованы т.-ф. электроны; очевидно, $\mathcal{E}_{\text{т.-ф}} \sim Ze/r_{\text{т.-ф}}^2$) смещения электронов под действием поля, определяющие дипольный момент, будут порядка $r_{\text{т.-ф}}$, так что $d \sim Zer_{\text{т.-ф}}$. Поэтому из соотношения $d \sim \beta \mathcal{E}$ при $\mathcal{E} \sim \mathcal{E}_{\text{т.-ф}}$ следует ($r_{\text{т.-ф}} \sim a_0 Z^{-1/3}$)

$$\beta_{\text{т.-ф}} \sim \frac{d}{\mathcal{E}} \sim \frac{Zer_{\text{т.-ф}}}{Ze/r_{\text{т.-ф}}^2} = r_{\text{т.-ф}}^3 \sim Z^{-1} a_0^3 = Z^{-1} \text{ ат. ед.},$$

т. е. поляризуемость равна по порядку величины кубу т.-ф. радиуса атома.

Совершенно аналогичная оценка для валентных электронов, находящихся на периферии атома ($r \sim a_0$), где характерная величина поля $\mathcal{E} \sim e/a_0^2$, дает $\beta_{\text{вал}} \sim a_0^3 = 1$ ат. ед. Следовательно (так как $Z \gg 1$), поляризуемость атома определяется валентными, а не томас-фермиевскими электронами.

11.59. а) Поляризуемость определяется обобществленными (валентными) электронами, и порядок ее величины $\beta \sim 1$ ат. ед. можно получить, основываясь на рассуждениях, аналогичных проведенным в предыдущей задаче.

б) В системе координат, жестко связанной с осью молекулы, $\mathbf{d} \neq 0$ (очевидно, $d \sim 1$ ат. ед. и вектор \mathbf{d} направлен вдоль оси молекулы). Однако в стационарных состояниях молекулы ее средний дипольный момент равен нулю, так как он из-за вращения молекулы определяется усреднением \mathbf{d} по всем ориентациям оси молекулы, являющимся равновероятными (при $K = 0$). При наложении поля имеем $\mathbf{d}_{\text{инд}} = \beta \mathcal{E}$, и для оценки величины β замечаем, что условие $d_{\text{инд}} \sim ea_0$ будет выполнено лишь при преимущественной ориентации оси молекулы (а следовательно, и вектора \mathbf{d}) вдоль поля \mathcal{E} , но для этого требуется, чтобы энергия взаимодействия диполя с электрическим полем (величина порядка $d\mathcal{E}$) была сравнима с энергией вращения молекулы, имеющей порядок величины \hbar^2/Ma_0^2 ($M \sim 10^3 \div 10^4 m_e$ — приведенная масса ядер), т. е. $\mathcal{E} \sim \frac{\hbar^2}{Ma_0^2 d}$. Поэтому

$$\beta \sim \frac{d_{\text{инд}}}{\mathcal{E}} \sim \frac{(ea_0)^2 Ma_0^2}{\hbar^2} = \frac{M}{m_e} a_0^3 = \frac{M}{m_e} \text{ ат. ед.},$$

т. е. поляризуемость молекул, имеющих дипольный момент, много больше поляризуемости атомов, а также молекул, не имеющих дипольного момента.

Указанные выше оценки поляризуемости можно получить строго из анализа точной формулы, определяющей величину β . Читателю предлагается убедиться в этом самостоятельно.

11.60. Стационарные состояния молекулы в отсутствие поля определяются квантовыми числами n , Λ ($\Lambda = 0$), S ($S = 0$), v , K , M (n — совокупность квантовых чисел, определяющих в. ф. электронного терма, за исключением Λ и S). В. ф. таких состояний имеют вид

$$\Psi_{n\nu KM} = \Psi_n^{\text{эл}}(\mathbf{R}; \xi_1, \xi_2, \dots) \Psi_v^{\text{кол}}(R) \Psi_{KM}^{\text{вр}}(\theta, \varphi) \quad (\Lambda = S = 0), \quad (1)$$

а энергия состояния равна $E = E_{n\Lambda S}^{\text{эл}} + \hbar\omega_{\text{кол}}(v + 1/2) + B_e K(K + 1)$, так что состояния, отличающиеся лишь величиной M , являются вырожденными (ξ_a — пространственные и спиновые переменные электронов).

Матричные элементы возмущения $V = -\hat{\mathbf{d}}\boldsymbol{\xi}$, где $\hat{\mathbf{d}}$ — оператор дипольного момента молекулы, удобно вычислять в два приема: сначала интегрировать по координатам электронов и относительному расстоянию R между ядрами (но при фиксированной ориентации оси молекулы), а затем интегрировать по переменным θ, φ , определяющим направление оси молекулы. В случае диагональных по квантовым числам n, v матричных элементов первое интегрирование дает

$$\int (\Psi_n^{\text{эл}} \Psi_v^{\text{кол}})^* \hat{\mathbf{d}} \Psi_n^{\text{эл}} \Psi_v^{\text{кол}} d\tau = \mathbf{d} = d\mathbf{n}_0 \quad (\mathbf{n}_0 = \mathbf{R}/R) \quad (2)$$

(то, что вектор \mathbf{d} направлен вдоль оси молекулы, очевидно из соображений симметрии). Направив ось z вдоль поля $\boldsymbol{\xi}$ и учитывая то обстоятельство, что в. ф. $\Psi_{KM}^{\text{рп}}$ (при $\Lambda = 0$) является шаровой функцией $Y_{KM}(\theta, \varphi)$, находим, что матричные элементы возмущения между в. ф. (1), относящимися к данному уровню молекулы (т. е. отличающимися лишь значением M), равны нулю, так как

$$\int Y_{KM}^* Y_{KM'} \cos \theta d\Omega = 0.$$

Соответственно в первом порядке теории возмущений уровни молекулы не смещаются и не расщепляются. Так как при наличии однородного поля проекция момента на направление поля является «хорошим» квантовым числом, то в. ф. (1) являются правильными функциями нулевого приближения, и при применении теории возмущений можно использовать ее стандартные формулы, относящиеся к невырожденным состояниям. Поправка второго порядка имеет вид

$$E_k^{(2)} = \sum_{k'}' \frac{|\langle k' | \hat{\mathbf{d}} \boldsymbol{\xi} | k \rangle|^2}{E_k - E_{k'}} \quad (3)$$

(для краткости используем один индекс k для описания различных состояний молекулы, $k = \{n, \Lambda, S, v, K, M\}$).

Легко заметить, что в формуле (3) можно ограничиться лишь такими состояниями $|k'\rangle$, для которых $n' = n, \Lambda' = S' = 0$ (при этом $E_k - E_{k'} = B_e [K(K+1) - K'(K'+1)]$), так как вклад в сумму состояний с другими квантовыми числами существенно меньше из-за гораздо большей величины энергетических знаменателей. Учитывая это обстоятельство и соотношение (2), можно записать выражение (3) в виде

$$E_{nKM}^{(2)} = \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{B_e} \sum_{K', M'}' \frac{|\langle K'M' | \cos \theta | KM \rangle|^2}{K(K+1) - K'(K'+1)} = \frac{d^2 \mathcal{E}^2 [K(K+1) - 3M^2]}{2B_e K(K+1)(2K+1)(2K+3)} \quad (4)$$

(так как в. ф. состояния $|K, M\rangle$ является шаровой функцией, то замечаем, что сумма (4) совершенно аналогична рассмотренной

в 8.12, так что ответ к указанной задаче решает и данную: достаточно сделать замену $l \rightarrow K, m \rightarrow M, \hbar^2/2I \rightarrow B_e$.

11.61. Направив ось z вдоль магнитного поля, представим гамильтониан атома в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{V} = \mu \mathcal{H} \hat{l}_z + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8mc^2} (x^2 + y^2),$$

где \hat{H}_0 — гамильтониан водородоподобного атома в отсутствие поля, $-e$ ($e > 0$), m — заряд и масса мезона, $\mu = e\hbar/2mc$ — магнетон (мезонный) Бора (считаем массу ядра $M = \infty$, по поводу учета конечности M см. 11.64). Так как оператор \hat{H} , как и \hat{H}_0 , коммутирует с оператором \hat{l}_z , то хорошо известные с. ф. невозмущенного гамильтониана Ψ_{nl_z} являются правильными функциями нулевого приближения также и при наличии возмущения \hat{V} , так что поправка первого порядка к уровням энергии равна

$$E_{nl_z}^{(1)} = \mu \mathcal{H} \int \Psi_{nl_z}^* \hat{l}_z \Psi_{nl_z} dV = \mu \mathcal{H} l_z$$

(мы ограничились первым слагаемым в возмущении, $\mu \mathcal{H} l_z$, так как учет в $E^{(1)}$ второго слагаемого, пропорционального \mathcal{H}^2 , явился бы превышением точности). Так как возможные (целочисленные) значения l_z удовлетворяют условиям $|l_z| \leq l \leq n-1$, то n^2 -кратно вырожденный уровень $E_n^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана в первом порядке расщепляется на $(2n-1)$ подуровней, каждый из которых вырожден $(n-|l_z|)$ раз (при данных n , $|l_z|$ возможные значения l равны $|l_z|, |l_z|+1, \dots, n-1$).

11.62. Задача решается аналогично предыдущей. В гамильтониане появляется дополнительное слагаемое $\hat{V}' = 2\mu \mathcal{H} \hat{s}_z$. Правильные функции нулевого приближения имеют вид $\Psi_{nl_z} \chi_{s_z}$, где χ_{s_z} — спиновые функции, являющиеся с. ф. оператора \hat{s}_z (напомним, что $\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и т. д.). Поправка первого порядка к уровням энергии равна

$$E_{nl_z s_z}^{(1)} = \mu \mathcal{H} (l_z + 2s_z). \quad (1)$$

Условия применимости результата (1) предполагают, что расщепление уровня $\Delta E_{\text{Зеем}} = E_{n, n-1, 1/2}^{(1)} - E_{n, -n+1, -1/2}^{(1)} = 2\mu \mathcal{H}$ много больше интервала тонкой структуры $\Delta E_{\text{ФС}}$, но много меньше расстояния между соседними уровнями невозмущенного гамильтониана $\Delta E_n = E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)} = 13,6 [n^{-2} - (n+1)^{-2}]$ эВ. Для $n=2$ условие $\Delta E_{\text{ФС}} \ll \Delta E_{\text{Зеем}} \ll \Delta E_n$ принимает вид $5 \cdot 10^{-5}$ эВ $\ll \ll \frac{2e\hbar \mathcal{H}}{mc} \ll 2$ эВ, или $3 \cdot 10^3$ эрстед $\ll \mathcal{H} \ll 10^8$ эрстед (напомним, что $e/a_0^2 = 5,14 \cdot 10^9$ В/см = $1,71 \cdot 10^7$ эрстед, a_0 — борковский радиус).

11.63. Возмущение (точнее, его часть, линейная по полю \mathcal{H}) имеет вид $\hat{V} = \mu\mathcal{H}(l_z + 2\hat{s}_z)^*$, ось z направлена вдоль магнитного поля. «Правильными» с. ф. гамильтониана в нулевом приближении являются функции вида $\Psi = \Psi_{100}\chi_{SS_z}$, где $\Psi_{100}(r)$ — в. ф. основного состояния атома водорода (без спина), χ_{SS_z} — спиновая функция протона и электрона, причем S и S_z — суммарный спин и его проекция на ось z . Учитывая явный вид функций χ_{SS_z} (см., например, 5.17) и то обстоятельство, что в основном состоянии атома водорода $l = 0$, легко находим, что в первом порядке энергия синглетной компоненты сверхтонкой структуры не изменяется, а триплетный уровень расщепляется на три подуровня с энергиями

$$E_{S=1, S_z}^{(1)} = \mu\mathcal{H}S_z \quad (\text{т. е. } E^{(1)} = 0, \pm \mu\mathcal{H}).$$

Условием применимости полученных результатов является выполнение неравенства $\mu\mathcal{H} \ll \Delta E_{\text{HFS}}$, где ΔE_{HFS} — величина сверхтонкого расщепления, см. 11.4 (при $\mu\mathcal{H} \geq \Delta E_{\text{HFS}}$ становится существенным «перемешивание» состояний с $S = 0$ и $S = 1, S_z = 0$, так как матричный элемент $\langle S = 1, S_z = 0 | \hat{V} | S = 0 \rangle \neq 0$).

11.64. Задача двух тел, взаимодействующих друг с другом, сводится, как известно, к задаче одного тела во внешнем поле. При этом гамильтониан системы

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (1)$$

преобразуется к виду $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, где

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M}, \quad \hat{H}_2 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(r), \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}},$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/M, \quad \mathbf{r}_{1,2} = \mathbf{R} \pm \frac{m_2,1\mathbf{r}}{M}.$$

Если заряженные частицы, взаимодействующие друг с другом, находятся в однородном электрическом поле, то к гамильтониану (1) следует добавить дополнительное слагаемое $V = -(\mathbf{e}_1\mathbf{r}_1 + \mathbf{e}_2\mathbf{r}_2) \cdot \boldsymbol{\xi}_0$. При этом гамильтониан системы также можно представить в виде $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ — суммы двух «одночастичных» гамильтонианов

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} - (e_1 + e_2) \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\xi}, \quad \hat{H}_2 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(r) - \frac{e_1m_2 - e_2m_1}{M} \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\xi}, \quad (2)$$

первый из которых описывает движение центра масс системы, а второй представляет гамильтониан водородоподобного атома,

*) Здесь \hat{s}_z — оператор электронного спина; взаимодействием же магнитного момента протона, ввиду его малости ($\mu_p/\mu_e \sim m_e/m_p \sim 10^{-3}$), с магнитным полем пренебрегается.

находящегося в электрическом поле (при $e_1 = -e$, $e_2 = Ze$, $U = -Ze^2/r$). Последнее слагаемое в \hat{H}_2 , $\hat{V} = -\frac{e_1 m_2 - e_2 m_1}{M} \mathbf{r} \mathcal{E}$, представляет оператор взаимодействия такого атома с электрическим полем. Его можно записать в виде $\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}} \mathcal{E}$, где $\hat{\mathbf{d}}$ — оператор дипольного момента атома относительно его центра масс (при $e_1 \neq -e_2$ дипольный момент зависит от того, по отношению к какой точке пространства он определен).

При наложении однородного магнитного поля, векторный потенциал которого выберем равным $\mathbf{A} = 1/2 [\mathcal{H} \mathbf{r}]$, гамильтониан (1) принимает вид

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}}_1 - \frac{e_1}{2c} [\mathcal{H} \mathbf{r}_1])^2}{2m_1} + \frac{(\hat{\mathbf{p}}_2 - \frac{e_2}{2c} [\mathcal{H} \mathbf{r}_2])^2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (3)$$

В системе центра масс, где $\mathbf{r}_1 = \frac{m_2}{M} \mathbf{r}$, $\mathbf{r}_2 = -\frac{m_1}{M} \mathbf{r}$, $\hat{\mathbf{p}}_1 = -\hat{\mathbf{p}}_2 \equiv \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$, гамильтониан (3) можно записать в виде ($\hat{\mathbf{I}} = -i[\mathbf{r} \nabla_{\mathbf{r}}]$)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(r) + \left\{ -\left(\frac{e_1 m_2}{m_1} + \frac{e_2 m_1}{m_2} \right) \frac{\hbar \hat{\mathbf{I}} \mathcal{H}}{2Mc} + \left(\frac{e_1^2 m_2^2}{m_1} + \frac{e_2^2 m_1^2}{m_2} \right) \frac{[\mathcal{H} \mathbf{r}]^2}{8M^2 c^2} \right\}. \quad (4)$$

Последнее слагаемое в этом выражении при $e_1 = -e$, $e_2 = Ze$, $U = -Ze^2/r$ описывает взаимодействие водородоподобного атома с магнитным полем, учитывающее конечность массы ядра.

Следует, однако, подчеркнуть, что полученное выражение (4) для гамильтониана не является строгим, так как при наличии магнитного поля задача двух тел уже не допускает разделения переменных, т. е. гамильтониан нельзя представить в виде $\hat{H} = \hat{H}_1(\mathbf{R}) + \hat{H}_2(\mathbf{r})$.

Имея в виду полученные выражения (2), (4) для гамильтонианов, не представляет труда выяснить влияние конечности массы ядра на эффекты Штарка и Зеемана в водородоподобных атомах.

11.65. Для позитрония, находящегося в магнитном поле, гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} - \frac{e^2}{r} + 2\mu (\hat{s}_{ze} - \hat{s}_{z\pi}) \mathcal{H} \quad \left(\mu = \frac{e\hbar}{2mc} \right) \quad (1)$$

(мы ограничились лишь линейными по \mathcal{H} членами; оператор орбитального магнитного момента равен нулю, см. предыдущую задачу; приведенная масса системы равна $m/2$).

Так как операторы $\hat{s}_{ze, n}$ проекций спинов частиц на ось z , направленную вдоль магнитного поля, коммутируют с гамильтонианом, то, очевидно, с. ф. гамильтониана (1) являются функции вида $\Psi_{nlms_{ze}s_{zn}} = \Psi_{nlm}\chi_{s_{ze}}\chi_{s_{zn}}$, где Ψ_{nlm} — хорошо известные с. ф. гамильтониана атома водорода (с массой $m/2$), χ_{s_z} — с. ф. оператора \hat{s}_z . Этим с. ф. соответствуют энергетические уровни

$$E_{ns_{ze}s_{zn}} = E_n^{(0)} + 2\mu(s_{ze} - s_{zn})\mathcal{H} \quad \left(E_n^{(0)} = -\frac{me^4}{4\hbar^2 n^2}\right),$$

т. е. каждый $4n^2$ -кратно вырожденный уровень невозмущенного позитрония в магнитном поле расщепляется на три подуровня.

11.66. Как известно, атом в состоянии с квантовыми числами $L = S = 0$ является диамагнитным и его магнитная восприимчивость равна

$$\chi_{ат} = -\frac{e^2}{6mc^2} \sum_a \bar{r}_a^2.$$

Учитывая приближенный вид в. ф. основного состояния атома гелия

$$\Psi = \frac{Z_{эфф}^3}{\pi a_0^3} \exp\left[-\frac{Z_{эфф}}{a_0}(r_1 + r_2)\right] \Psi_{S=0}^{спин}, \quad Z_{эфф} = \frac{27}{16},$$

легко находим $\bar{r}_1^2 = \bar{r}_2^2 = 3a_0^2 Z_{эфф}^{-2}$ и $\chi_{ат} = -\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 a_0^3 Z_{эфф}^{-2}$. Магнитная восприимчивость 1 см^3 газа равна $\chi_{газ} = n_0 \chi_{ат} = -7,7 \cdot 10^{-11}$ ($n_0 = 2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ — число атомов газа в 1 см^3 при нормальных условиях, $a_0^3 = 1,49 \cdot 10^{-25} \text{ см}^3$, $e^2/\hbar c \approx 1/137$).

11.67. Гамильтониан атома в магнитном поле имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_e(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)\mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a [\mathbf{r}_a \mathcal{H}]^2, \quad (1)$$

где \hat{H}_0 — гамильтониан атома в отсутствие поля, включающий релятивистские поправки, приводящие к тонкой структуре атома. Рассматриваемый уровень 3P_0 является невырожденным, а его сдвиг в первом порядке по \mathcal{H} , очевидно, равен нулю ($\bar{L}_z = \bar{S}_z = 0$, так как при $J = 0$ нет выделенного направления, вдоль которого могли бы быть направлены векторы $\bar{\mathbf{L}}$ и $\bar{\mathbf{S}}$).

Во втором порядке по полю \mathcal{H} в сдвиге уровня $E^{(2)}$ возникают слагаемые двух типов: получающиеся в результате усреднения последнего слагаемого в гамильтониане (1) по в. ф. невозмущенного уровня и обычная поправка второго порядка теории возмущений для взаимодействия

$$\hat{V} = \mu_e(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)\mathcal{H}.$$

Оценка первого из указанных слагаемых в $E^{(2)}$ дает, очевидно, величину порядка $e^2 a_0^2 \mathcal{H}^2 / mc^2$. Вклад же в $E^{(2)}$ слагае-

мого второго типа существенно больше. Действительно,

$$E_k^{(2)} = \sum_{k'}' \frac{|\langle k' | \hat{V} | k \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}}. \quad (2)$$

В этой сумме $E_k^{(0)}$ представляют с. з. оператора \hat{H}_0 . Если состояния $|k\rangle$ и $|k'\rangle$ относятся к различным мультиплетам, то $|E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}| \sim e^2/a_0 \sim 10 \text{ эВ}$. Но в случае, если указанные состояния представляют различные компоненты тонкой структуры одного терма, оценка существенно изменяется: $|E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}| \sim \sim (e^2/\hbar c)^2 e^2/a_0$, и если при этом матричный элемент $\langle k' | \hat{V} | k \rangle$ не равен нулю, то вклад таких слагаемых оказывается доминирующим. В конкретном случае 2^3P_0 -состояния атома гелия такое слагаемое в сумме (2) отвечает 2^3P_1 -состоянию с $J_z = 0$. Поэтому оценка суммы (2) принимает вид $E^{(2)} \sim a_0^3 \mathcal{H}^2$ и, соответственно, магнитная восприимчивость оказывается величиной порядка $\chi_{\text{ат}} \sim a_0^3 = 1 \text{ ат. ед.}$ (так как согласно правилу Гунда $E(2^3P_0) < E(2^3P_1)$, то $E^{(2)} < 0$ и $\chi_{\text{ат}} > 0$, т. е. атом гелия в состоянии 2^3P_0 является парамагнитным).

11.68. Гамильтониан молекулы в магнитном поле имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_e (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a \{r_a^2 \mathcal{H}^2 - (\mathbf{r}_a \mathcal{H})^2\}. \quad (1)$$

Учитывая вид с. ф. Ψ_{nvKM} гамильтониана \hat{H}_0 , приведенный в 11.60, и используя указанный в этой задаче способ вычисления матричных элементов, замечаем, что в первом порядке по \mathcal{H} сдвига уровней не происходит, так как

$$\int (\Psi^{\text{эл}} \Psi^{\text{кол}})^* \hat{\mathbf{L}} (\Psi^{\text{эл}} \Psi^{\text{кол}}) d\tau' \equiv C \mathbf{n}_0 = \Lambda \mathbf{n}_0 = 0, \quad \bar{\mathbf{S}} = 0. \quad (2)$$

Во втором порядке по \mathcal{H} сдвиг уровня определяется выражением

$$E_{KM}^{(2)} = \frac{e^2 \mathcal{H}_i \mathcal{H}_k}{8mc^2} \int \Psi_{nvKM}^* \sum_a \{r_a^2 \delta_{ik} - x_{ai} x_{ak}\} \Psi_{nvKM} d\tau \quad (3)$$

(вклад в $E^{(2)}$ членов второго порядка теории возмущений по взаимодействию $\hat{V}_1 = \mu_e (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathcal{H}$ равен нулю, так как матричные элементы возмущения V_1 , входящие в соответствующую сумму, равны нулю, как и в выражении (2)).

Выражение (3) после интегрирования по координатам электронов и переменной R принимает вид

$$E_{KM}^{(2)} = \frac{e^2}{8mc^2} \mathcal{H}_i \mathcal{H}_k \int Y_{KM}^* \{a \delta_{ik} - b n_{0i} n_{0k}\} Y_{KM} d\Omega,$$

где a, b — некоторые постоянные, не зависящие от K, M . Учитывая известное соотношение (ось $z \parallel \mathcal{H}$)

$$\int Y_{KM}^* n_{03} n_{03} Y_{KM} d\Omega \equiv \int \cos^2 \theta |Y_{KM}|^2 d\Omega = \frac{2K^2 + 2K - 1 - 2M^2}{(2K-1)(2K+3)},$$

находим смещение энергетических уровней

$$E_{KM}^{(2)} = \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8mc^2} \left\{ a - b \frac{2K^2 + 2K - 1 - 2M^2}{(2K-1)(2K+3)} \right\}.$$

11.69. Оператор взаимодействия заряженной частицы с атомом (обычное электростатическое взаимодействие системы зарядов) с учетом малости размеров атома по сравнению с расстоянием между атомом и частицей имеет вид (Ze — заряд частицы, атом — в начале координат)

$$\hat{U} = Ze\varphi_{\text{ат}}(\mathbf{R}) = Ze \left\{ \frac{d\mathbf{R}}{R^3} + \varphi_{\text{ат квалдр}}(\mathbf{R}) + \dots \right\}. \quad (1)$$

В первом порядке теории возмущений взаимодействие $U(R)$, получающееся усреднением оператора \hat{U} по в. ф. основного состояния атома водорода, отсутствует, так как средние значения всех мультипольных моментов атома (диполя, квадруполь и т. д.) равны нулю в силу сферической симметрии распределения заряда в основном, s -состоянии атома. Во втором порядке, ограничиваясь в выражении (1) первым, наименее быстро убывающим с ростом R слагаемым $V_1 = Ze d\mathbf{R}/R^3 = -Ze^2(\mathbf{r}\mathbf{R})/R^3$, получаем искомое взаимодействие:

$$U(R) = -\frac{\beta_0}{2} \left(\frac{Ze}{R^2} \right)^2 = -\frac{9Z^2 e^2 a_0^3}{4R^4}, \quad (2)$$

где $\beta_0 = 9a_0^3/2$ — поляризуемость основного состояния атома водорода; мы учли, что взаимодействие V_1 эквивалентно взаимодействию атома с однородным электрическим полем $\mathcal{E} = -Ze\mathbf{R}/R^3$. Взаимодействие (2) имеет, очевидно, характер притяжения.

11.70. Учитывая результат предыдущей задачи, легко находим искомое взаимодействие:

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{9a_0^3}{4} \left\{ \frac{Z_1^2 e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_0|^4} + \frac{Z_2^2 e^2}{|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_0|^4} \right\} - \frac{9a_0^3 Z_1 Z_2 e^2 (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_0)(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_0)}{2|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_0|^3 |\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_0|^3}, \quad (1)$$

где $\mathbf{R}_0, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ — радиусы-векторы атома и заряженных частиц (их заряды $Z_1 e$ и $Z_2 e$ соответственно). Последнее слагаемое в выражении (1), зависящее от переменных трех частиц, означает, что взаимодействие не имеет аддитивного характера.

11.71. Как и в 11.69, взаимодействие определяется дипольным слагаемым $\mathcal{V} = Ze(d\mathbf{R})/R^3$ (при этом существенно, что молекула находится в состоянии с $K=0$, так как в противном

случае доминирующим будет квадрупольное взаимодействие, отличное от нуля уже в первом порядке теории возмущений и убывающее с ростом R , как R^{-3}). Расчет поправки второго порядка по указанному выше взаимодействию для двухатомной молекулы, имеющей $\mathbf{d} \neq 0$ и находящейся в $^1\Sigma$ -состоянии, легко может быть выполнен аналогично тому, как это было сделано при решении задачи 11.60: в сумме, определяющей поправку второго порядка теории возмущений, доминирующую роль играют возбужденные состояния молекулы, имеющие такие же квантовые числа $n, \Lambda = 0, S = 0, v = 0$, как и основное состояние, и отличающиеся лишь вращательными квантовыми числами (для таких состояний энергетические знаменатели аномально малы). При этом установленная в 11.60 аналогия свойств молекулы с $\mathbf{d} \neq 0$ в $^1\Sigma$ -состоянии и пространственного ротатора, имеющего дипольный момент, по отношению к поведению их в электрическом поле позволяет, воспользовавшись известным значением $\beta_0 = 2Id^2/3\hbar^2$ для поляризуемости основного состояния ротатора (см. 8.11), найти искомое выражение для энергии взаимодействия ($B_e = \hbar^2/2I$):

$$U(R) = -\frac{\beta_0}{2} \left(\frac{Ze}{R^2}\right)^2 = -\frac{Z^2 e^2 d^2}{6B_e R^4}.$$

11.72. Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} \approx \hat{H}_{0,1} + \hat{H}_{0,2} + \hat{U} = \hat{H}_{0,1} + \hat{H}_{0,2} - \frac{e^2(2z_1 z_2 - x_1 x_2 - y_1 y_2)}{R^3},$$

где $\hat{H}_{0,1(2)}$ — гамильтонианы изолированных атомов водорода.

Среднее значение энергии $\bar{E}(\alpha, R)$ в состоянии, описываемом в. ф. $\Psi_{\text{проб}}$, при соответствующем выборе параметра α можно рассматривать как некоторое приближенное значение энергии основного состояния системы. Его легко вычислить, учитывая значения следующих интегралов:

1) $\langle 0 | x | 0 \rangle = \int x \Psi_0^2(r) dV = 0$ в силу нечетности по x подынтегральной функции; точно так же равны нулю все интегралы, в которые какая-либо компонента векторов \mathbf{r}_1 или \mathbf{r}_2 входит в нечетной степени;

2) $\langle 0 | \hat{H}_0 | 0 \rangle = -e^2/2a_0$, так как Ψ_0 — с. ф. оператора \hat{H}_0 ;

3) $\langle 0 | x^2 | 0 \rangle = \langle 0 | y^2 | 0 \rangle = \langle 0 | z^2 | 0 \rangle = \frac{1}{3} \langle 0 | r^2 | 0 \rangle = \frac{1}{3} \int r^2 \Psi_0^2(r) dV = a_0^2$;

4) $\langle 0 | z \hat{H}_0 z | 0 \rangle = \int \Psi_0 z \hat{H}_0 (z \Psi_0) dV = 0$; наиболее простой способ вычисления этого матричного элемента приведен в решении задачи 11.54, где он обозначен $\langle \Psi_1 | \hat{H}_0 | \Psi_1 \rangle$.

Для пробной функции вида а), учитывая сказанное выше, находим $C^2 = (1 + \alpha^2 a_0^4)^{-1} \approx 1 - \alpha^2 a_0^4$ (из условия нормировки) и

$$\bar{E} = -\frac{e^2}{a_0} + \alpha^2 e^2 a_0^3 - 2\alpha \frac{2a_0^4 e^2}{R^3}.$$

Минимизируя это значение по параметру α , находим приближенное значение энергии основного состояния рассматриваемой системы из двух атомов водорода:

$$E_0(R) = \min \bar{E} = -\frac{e^2}{a_0} - \frac{4e^2 a_0^5}{R^6},$$

где первое слагаемое представляет энергию двух изолированных атомов, а второе — энергию их взаимодействия:

$$U(R) = -\frac{4e^2 a_0^5}{R^6}. \quad (1)$$

Совершенно аналогично для пробной функции вида б) находим

$$C^2 \approx 1 - 6\alpha^2 a_0^4, \quad \bar{E} = -\frac{e^2}{a_0} + 6\alpha^2 e^2 a_0^3 + 12 \frac{\alpha e^2 a_0^4}{R^3},$$

$$E_0(R) = -\frac{e^2}{a_0} - \frac{6e^2 a_0^5}{R^6}, \quad U(R) = -\frac{6e^2 a_0^5}{R^6}. \quad (2)$$

Так как вариационный расчет энергии основного состояния всегда дает завышенное значение E_0 , то из двух полученных выражений для $U(R)$, (1) и (2), второе является более точным.

Полученный закон убывания энергии взаимодействия атомов $U(R)$ соответствует силам Ван-дер-Ваальса.

Отметим, что точный численный расчет дает $U(R) = -6,5e^2 a_0^5 / R^6$ т. е. выражение (2) отличается от точного всего на 8%.

11.73. Взаимодействие молекул возникает во втором порядке теории возмущений по диполь-дипольному взаимодействию:

$$\hat{V} = \frac{(\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2) R^2 - 3(\mathbf{d}_1 \mathbf{R})(\mathbf{d}_2 \mathbf{R})}{R^5}$$

(при этом существенно, что молекулы имеют вращательные квантовые числа $K_1 = K_2 = 0$, так как в противном случае взаимодействие возникает в первом порядке по квадруполь-квадрупольному взаимодействию и убывает, как R^{-5}), т. е.

$$U(R) = E_0^{(2)} = \sum_{k_1, k_2}' \frac{|\langle k_1, k_2 | \mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 R^2 - 3(\mathbf{d}_1 \mathbf{R})(\mathbf{d}_2 \mathbf{R}) | 0, 0 \rangle|^2}{[E_{0,1} + E_{0,2} - E_{k_1} - E_{k_2}] R^{10}}, \quad (1)$$

где $k_{1,2}$ — наборы квантовых чисел, характеризующие стационарные состояния изолированных молекул (см. 11.60). Доминирующую роль в сумме (1) играют слагаемые, отвечающие таким состояниям молекул, все квантовые числа которых, за исключением K и M , такие же, как и у основных состояний, так как при этом аномально малы энергетические знаменатели. Выбрав ось z вдоль вектора \mathbf{R} и выполнив в матричных элементах интегрирование по координатам электронов и относительно расстоянию между ядрами, как это было сделано в 11.60,

запишем сумму (1) в виде

$$U(R) = - \sum_{K_1 M_1, K_2 M_2} \frac{d_1^2 d_2^2 |\langle K_1 M_1, K_2 M_2 | 3n_{1z} n_{2z} - \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2 | 0, 0 \rangle|^2}{[B_1 K_1 (K_1 + 1) + B_2 K_2 (K_2 + 1)] R^6} \quad (2)$$

(энергия состояния молекулы, отличающегося от основного лишь квантовыми числами K, M , равна $E_K = E_0 + BK(K+1)$); $\mathbf{n}_{1,2}$ — единичные векторы, определяющие ориентации осей молекул, в. ф. состояний $|K, M\rangle$ — шаровые функции.

Учитывая вид шаровых функций, легко находим, что матричный элемент $\langle K, M | \cos \theta | 0, 0 \rangle$ отличен от нуля лишь при $K=1, M=0$ и равен $\langle 1, 0 | \cos \theta | 0, 0 \rangle = -i/\sqrt{3}$. Аналогично можно найти и другие отличные от нуля матричные элементы, входящие в сумму (2):

$$\langle 1, 1 | n_x | 0, 0 \rangle = \langle 1, 1 | \sin \theta \cos \varphi | 0, 0 \rangle = -\langle 1, -1 | n_x | 0, 0 \rangle = \frac{i}{\sqrt{6}},$$

$$\langle 1, 1 | n_y | 0, 0 \rangle = \langle 1, 1 | \sin \theta \sin \varphi | 0, 0 \rangle = \langle 1, -1 | n_y | 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}.$$

Окончательное выражение для энергии взаимодействия молекул имеет вид $U(R) = - \frac{d_1^2 d_2^2}{3(B_1 + B_2) R^6}$.

11.74. Гамильтониан электрона до распада ядра \hat{H}_1 в момент распада мгновенно превращается в \hat{H}_2 , где

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2}\Delta - 1/r, \quad \hat{H}_2 = -\frac{1}{2}\Delta - 2/r.$$

Искомая вероятность определяется согласно общей формуле теории внезапных воздействий (см. 8.39). Учитывая вид в. ф. основного состояния водородоподобного атома с зарядом ядра Z $\Psi_0(r, z) = \sqrt{Z^3/\pi} \exp(-Zr)$, легко находим

$$w(0 \rightarrow 0) = \left| \int \Psi_0^*(r, Z=2) \Psi_0(r, Z=1) dV \right|^2 = \left(\frac{8\sqrt{8}}{27} \right)^2 \approx 0,70.$$

11.75. Задача решается аналогично предыдущей. Так как в условиях задачи орбитальный момент электрона сохраняется (поле — центральное) и до распада ядра он был равен $l=0$, то после распада ядра возможны переходы электрона лишь в состояния с $l=0$. Учитывая вид в. ф. Ψ_{nlm} с $n=2, l=m=0$

$$\Psi_{200}(r, Z) = \sqrt{Z^3/8\pi} (1 - Zr/2) e^{-Zr/2},$$

в результате элементарного интегрирования находим искомую вероятность:

$$w = \left| \int \Psi_{200}^*(r, Z=2) \Psi_{100}(r, Z=1) dV \right|^2 = 1/4.$$

11.76. Гамильтониан электрона при $t > 0$ ($t=0$ — момент распада ядра) приведен в 11.74 (где он обозначен \hat{H}_2). В. ф. непосредственно после распада ядра является в. ф. основного со-

стояния электрона в атоме водорода Ψ_0 . Средняя энергия электрона при $t > 0$ не зависит от времени и равна

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \langle \Psi_0 | \hat{H}_2 | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \left(-\frac{1}{2} \Delta - \frac{1}{r} \right) | \Psi_0 \rangle = \\ &= E_0 - \langle \Psi_0 | \frac{1}{r} | \Psi_0 \rangle = -1/2 - 1 = -3/2.\end{aligned}$$

Среднее значение энергии, приобретаемой электроном в результате распада ядра, равно $E_{\text{пр}} = \bar{E} - E_0 = -3/2 - (-1/2) = -1$ ат. ед. $= -27,2$ эВ ($E_{\text{пр}} < 0$, т. е. энергия электрона уменьшается).

11.77. Обычно под в. ф. атома понимают в. ф. электронной оболочки $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ (спиновые индексы для простоты не пишем), что соответствует рассмотрению движения электронов в системе центра масс атома, причем положение центра масс $\mathbf{R} = 0$ совпадает с положением ядра (учет движения ядра приводит к малым поправкам). В отсутствие внешних полей свободное движение центра масс не оказывает никакого влияния на в. ф. электронной оболочки. В рассматриваемой задаче ситуация иная. Так как ядру сообщается импульс, то движение центра масс не является свободным и следует выяснить влияние изменения этого движения на в. ф. электронной оболочки. Для этого рассмотрим в. ф. $\Psi_{\text{сист}}$, описывающую как электронную оболочку, так и движение центра масс. Непосредственно перед моментом «встряхивания» она имеет вид

$$\Psi_{\text{сист}} = \Psi_{\text{ц.м}}(\mathbf{R}_{\text{ц.м}}) \Psi_0(\boldsymbol{\rho}_1 - \mathbf{R}_{\text{ц.м}}, \boldsymbol{\rho}_2 - \mathbf{R}_{\text{ц.м}}, \dots), \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\rho}_a$ — радиусы-векторы электронов в произвольной системе координат, $\Psi_{\text{ц.м}}$ — в. ф. состояния центра масс системы. В результате «встряхивания» в. ф. изменяется. Сформулированные в условии задачи неравенства означают, что за время удара τ в. ф. электронной оболочки не успевает заметно измениться и не изменяется положение ядра (а следовательно, и положение центра масс), т. е. все изменение в. ф. состоит в умножении (1) на множитель $\exp(i\nu M \mathbf{R}_{\text{яд}}/\hbar)$, где M , $\mathbf{R}_{\text{яд}}$ — масса ядра и его радиус-вектор, что соответствует изменению импульса ядра на вектор $M\nu$, так что $\tilde{\Psi}_{\text{сист}} = e^{iM\nu \mathbf{R}_{\text{яд}}/\hbar} \Psi_{\text{сист}}$. Учитывая вид в. ф. (1) и очевидные соотношения

$$\begin{aligned}\sum_{a=1}^N m \boldsymbol{\rho}_a + M \mathbf{R}_{\text{яд}} &= (M + Nm) \mathbf{R}_{\text{ц.м}}, \quad M \mathbf{R}_{\text{яд}} = \\ &= M \mathbf{R}_{\text{ц.м}} - m \sum_a \boldsymbol{\rho}_a, \quad (2)\end{aligned}$$

в. ф. системы непосредственно после «встряхивания» можно записать в виде

$$\tilde{\Psi}_{\text{сист}} = e^{iM\nu \mathbf{R}_{\text{ц.м}}/\hbar} \Psi_{\text{ц.м}} \exp\left(-\frac{im\nu}{\hbar} \sum_a \boldsymbol{\rho}_a\right) \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots), \quad (3)$$

где \mathbf{r}_a — как и раньше, радиусы-векторы электронов в системе центра масс.

Формула (3) показывает, как в результате рассматриваемого «встряхивания» изменяются в. ф. центра масс системы и электронной оболочки. Таким образом, в. ф. электронной оболочки сразу после «встряхивания» имеет вид

$$\tilde{\Psi}_0 = \exp\left(-\frac{imv}{\hbar} \sum_a \mathbf{r}_a\right) \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (4)$$

и вероятности возбуждения различных состояний атома равны

$$w(0 \rightarrow n) = \left| \int \Psi_n^* \tilde{\Psi}_0 d\tau \right|^2. \quad (5)$$

11.78. Найдем w_0 — вероятность атому остаться в основном состоянии. Учитывая вид в. ф. основного состояния $\Psi_0 = (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/a_0)$, согласно формулам (4), (5) предыдущей задачи в результате элементарного интегрирования находим ($\mathbf{q} = m_e \mathbf{P} / \hbar M_p$)

$$w_0 = \left| \frac{1}{\pi a_0^3} \int e^{-2r/a_0 - i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV \right|^2 = \frac{1}{(1 + q^2 a_0^2/4)^4}.$$

Искомая вероятность возбуждения и ионизации атома w , очевидно, равна $w = 1 - w_0$. В предельных случаях слабого ($q a_0 \ll 1$) и сильного ($q a_0 \gg 1$) «встряхивания» имеем

$$w \approx \begin{cases} q^2 a_0^2 \ll 1, & q a_0 \ll 1, \\ 1 - (2/q a_0)^8 \approx 1, & q a_0 \gg 1. \end{cases}$$

Критерии применимости использованного приближения, сформулированные в предыдущей задаче, требуют уточнения в случае сильного «встряхивания». Так как при этом существенно ионизация (причем энергия вылетающих электронов $E_q \approx \hbar^2 q^2 / 2m_e$, а их импульс $\mathbf{p} \approx -\hbar \mathbf{q}$), то длительность толчка τ должна быть мала по сравнению с боровскими периодами для соответствующих переходов:

$$\tau \ll \hbar / |E_0 - E_q| \approx \hbar / E_q \sim m_e / \hbar q^2.$$

11.79. Задача решается совершенно аналогично 11.77. В. ф. системы непосредственно перед «встряхиванием» имеет вид

$$\Psi_{\text{сист}} = \Psi(\mathbf{R}_{\text{ц.м}}) \Psi_0(\rho_1 - \mathbf{R}_{\text{ц.м}}, \dots, \rho_N - \mathbf{R}_{\text{ц.м}}; \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2),$$

а сразу после «встряхивания» она становится равной

$$\tilde{\Psi}_{\text{сист}} = \exp(i\mathbf{P}\mathbf{R}_1/\hbar) \Psi(\mathbf{R}_{\text{ц.м}}) \Psi_0(\rho_1 - \mathbf{R}_{\text{ц.м}}, \dots; \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \quad (1)$$

(считаем, что импульс передается ядру 1, радиус-вектор которого \mathbf{R}_1). Учитывая соотношение

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_{ц.м} + \frac{M_2}{M} \mathbf{R} - \frac{m}{M} \sum_a (\rho_a - \mathbf{R}_{ц.м})$$

$$(\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2, \quad M = M_1 + M_2),$$

из формулы (1) находим изменение в.ф. молекулы в результате «встряхивания»:

$$\tilde{\Psi}_0 = \exp \left\{ \frac{iM_2 \mathbf{P} \mathbf{R}}{\hbar M} - \frac{im \mathbf{P}}{\hbar M} \sum_a \mathbf{r}_a \right\} \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots; \mathbf{R}).$$

Искомое выражение для вероятности перехода:

$$\omega(0 \rightarrow n) = \left| \int \Psi_n^* \tilde{\Psi}_0 d\tau \right|^2, \quad (2)$$

где интегрирование проводится по координатам всех электронов, относительному расстоянию R между ядрами и по угловым переменным, определяющим направление оси молекулы (а также проводится суммирование по спиновым индексам).

11.80. Искомая вероятность определяется по формуле (2) предыдущей задачи. С учетом вида в.ф. молекулы с электронным термом $^1\Sigma$, приведенного в 11.60, имеем

$$\omega_0 = \left| \int \exp \left\{ \frac{iM_2 \mathbf{P} \mathbf{R}}{\hbar M} - \frac{im \mathbf{P}}{\hbar M} \sum_a \mathbf{r}_a \right\} |\Psi_n^{\text{эл}} \Psi_0^{\text{кол}} \Psi_{00}^{\text{сп}}|^2 d\tau_{\text{эл}} dR d\Omega \right|^2 \quad (1)$$

(здесь символ $\int \dots d\tau_{\text{эл}}$ означает интегрирование по координатам электронов и суммирование по их спиновым переменным). Так как по условию $P/M \ll v_{\text{мол}} \sim v_{\text{ат}} \sim \hbar/ma_0$ (a_0 — борковский радиус), а характерные значения координат электронов $r \sim a_{\text{мол}} \sim a_{\text{ат}} \sim a_0$, то множитель $\exp \left\{ -\frac{im \mathbf{P}}{\hbar M} \sum_a \mathbf{r}_a \right\}$ можно заменить единицей, после чего имеем $\int |\Psi_n^{\text{эл}}|^2 d\tau_{\text{эл}} = 1$. Выполнив интегрирование по угловым переменным (это легко сделать, направив полярную ось вдоль вектора \mathbf{P}):

$$\frac{1}{4\pi} \int \exp \left\{ \frac{iM_2 P R \cos \theta}{\hbar M} \right\} d\Omega = \frac{e^{i\alpha R} - e^{-i\alpha R}}{2i\alpha R}, \quad \left(\alpha = \frac{M_2 P}{\hbar M} = \frac{M_1 M_2 V}{\hbar(M_1 + M_2)} \right),$$

приводим выражение (1) к виду

$$\omega_0 = \left| \int \frac{1}{2\alpha R} (e^{i\alpha R} - e^{-i\alpha R}) |\Psi_0^{\text{кол}}|^2 dR \right|^2. \quad (2)$$

В.ф. $\Psi_0^{\text{кол}}$ (основного состояния осциллятора)

$$\Psi_0^{\text{кол}} = \left(\frac{\mu \omega_e}{\hbar \pi} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{\mu \omega_e}{2\hbar} (R - R_0)^2 \right]$$

существенно отлична от нуля лишь в области $|R - R_0| \lesssim (\hbar/\mu\omega_e)^{1/2} \ll R_0$ (R_0 — расстояние между ядрами в положении равновесия, ω_e — частота колебаний молекулы, $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$); поэтому при вычислении интеграла в выражении (2) можно R в знаменателе заменить на R_0 , после чего он вычисляется элементарно, так как

$$\begin{aligned} \int |\Psi_0^{\text{кол}}|^2 e^{\pm i\alpha R} dR &= \\ &= \left(\frac{\mu\omega_e}{\hbar\pi}\right)^{1/2} e^{\pm i\alpha R_0} \int \exp\left(-\frac{\mu\omega_e}{\hbar}(R - R_0)^2 \pm i\alpha(R - R_0)\right) dR = \\ &= \exp\left(\pm i\alpha R_0 - \frac{\hbar\alpha^2}{4\mu\omega_e}\right). \end{aligned}$$

Окончательное выражение для искомой вероятности имеет вид

$$w_0 = \left(\frac{\sin \alpha R_0}{\alpha R_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\alpha^2}{2\mu\omega_e}\right).$$

11.81. Воспользуемся общей формулой для вероятности перехода (в единицу времени) из состояния д. с. в дифференциальный интервал состояний непрерывного спектра под действием периодического возмущения частоты ω :

$$d\omega_{\nu} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{\nu n}|^2 \delta(E_{\nu} - E_n^{(0)} - \hbar\omega) d\nu. \quad (1)$$

В рассматриваемой задаче возмущение (энергия электрона в электрическом поле) имеет вид

$$\hat{V} = e\mathcal{E}(t)\mathbf{r} = e\mathcal{E}_0\mathbf{r} \sin \omega t \equiv \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}^+e^{i\omega t},$$

т. е. $\hat{F} = ie\mathcal{E}_0\mathbf{r}/2$. В матричном элементе

$$F_{\nu n} = \int \Psi_{\nu}^* \hat{F} \Psi_n^{(0)} d\tau \quad (2)$$

под в. ф. $\Psi_n^{(0)}$ следует понимать в. ф. основного состояния атома водорода Ψ_0 , а под Ψ_{ν} — в. ф. $\Psi_{\mathbf{k}}$ свободного электрона с волновым вектором \mathbf{k} (напомним, что ν представляет набор величин для описания состояний непрерывного спектра), т. е.

$$\Psi_n^{(0)} = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}, \quad \Psi_{\nu} = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad \left(a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}\right).$$

Для вычисления интеграла (2) ($d\tau \equiv dV$) введем сферическую систему координат r, θ, φ с полярной осью вдоль вектора \mathbf{k} и обозначим Θ, Φ_0 полярный и азимутальный углы вектора \mathcal{E}_0 . Тогда

$$\mathcal{E}_0\mathbf{r} = \mathcal{E}_0 r [\cos \theta \cos \Theta + \sin \theta \sin \Theta \cos(\varphi - \Phi_0)]$$

и матричный элемент $F_{\nu n}$ после простого интегрирования оказывается равным

$$F_{\nu n} = \frac{ie\mathcal{E}_0}{4\pi^2 \sqrt{2a_0^3}} \iiint e^{-\frac{r}{a_0} - ikr \cos \theta} [\cos \theta \cos \Theta + \\ + \sin \theta \sin \Theta \cos(\varphi - \varphi_0)] r^3 dr \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{4\sqrt{2} e\mathcal{E}_0 \cos \Theta ka_0^{7/2}}{\pi (1 + k^2 a_0^2)^3} \quad (3)$$

(удобно сначала проинтегрировать по φ , затем по r и, наконец, по $x \equiv \cos \theta$). Учитывая, что

$$d\nu \equiv d^3k = k^2 dk d\Omega_{\mathbf{k}} = k^2 \frac{dk}{dE_k} dE_k d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{mk dE_k d\Omega_{\mathbf{k}}}{\hbar^2},$$

и используя значение (3), перепишем выражение (1) в виде

$$d\omega_{\mathbf{k}} = \frac{2^6}{\pi} \frac{ma_0^7 k^3 e^2 \mathcal{E}_0^2 \cos^2 \Theta}{\hbar^3 [1 + k^2 a_0^2]^6} \delta[E_k - E_n^{(0)} - \hbar\omega] dE_k d\Omega_{\mathbf{k}}. \quad (4)$$

Интегрируя (4) по E_k , легко находим

$$d\omega_{\mathbf{k}} = \frac{64}{\pi} \frac{a_0^3 \mathcal{E}_0^2}{\hbar} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6 \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right)^{3/2} \cos^2 \Theta d\Omega_{\mathbf{k}} \quad (5)$$

(мы ввели ω_0 согласно формуле $E_{n=1} = -\frac{e^2}{2a_0} = -\hbar\omega_0$).

Выражение (5) имеет, очевидно, следующий смысл: оно определяет вероятность ионизации атома в единицу времени, при которой направление импульса вылетающего электрона ($\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$) заключено внутри телесного угла $d\Omega_{\mathbf{k}}$; энергия электрона равна $E = \hbar(\omega - \omega_0)$.

Интегрируя (5) по всем углам вылета электрона, получаем полную вероятность ионизации атома ω_i в единицу времени:

$$\omega_i(\omega) = \frac{256}{3} \frac{a_0^3 \mathcal{E}_0^2}{\hbar} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6 \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right)^{3/2}.$$

Так как при решении задачи в качестве в. ф. непрерывного спектра были использованы плоские волны, то, строго говоря, полученные выражения справедливы лишь при условии $\omega \gg \omega_0$, когда скорость вылетающего электрона много больше $v_{ат}$.

Отметим, что при $\omega < \omega_0$ вероятность ионизации атома согласно формуле (1) равна нулю. Это, однако, не означает, что при таких значениях ω вообще не происходит ионизации атома, так как отличная от нуля вероятность ионизации возникает в более высоких порядках теории возмущений.

11.82. Рассматриваемая система «ядро + K -электрон» описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_{яд} - \frac{1}{2} \Delta_e - \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|}, \quad (1)$$

где $H_{яд}$ — гамильтониан ядерной подсистемы, сумма в (1) берется по всем протонам ядра. Представив энергию взаимодействия электрона с ядром в виде

$$U = - \sum_p \frac{1}{|r_e - r_p|} = - \frac{Z}{r_e} - \sum_p \left(\frac{1}{|r_e - r_p|} - \frac{1}{r_e} \right) \equiv - \frac{Z}{r_e} + V$$

(начало координат выбрано в центре масс ядра), замечаем, что V представляет часть взаимодействия, зависящую от состояния ядерной подсистемы и являющуюся ответственной за рассматриваемый в задаче переход, вероятность которого может быть рассчитана согласно общей формуле для вероятности перехода под действием постоянного возмущения:

$$d\omega_v = 2\pi |V_{vn}|^2 \delta(E_v - E_n^{(0)}) dv. \quad (2)$$

Матричный элемент V_{vn} содержит в. ф. $\Psi_n^{(0)}$ и Ψ_v , которые в рассматриваемой задаче имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_n^{(0)} &= \Psi_0^{яд} \Psi_0, & \Psi_0 &= (Z^3/\pi)^{1/2} e^{-Zr_e}, \\ \Psi_v &= \Psi_1^{яд} \Psi_k, & \Psi_k &= (2\pi)^{-3/2} e^{ikr_e}, \end{aligned}$$

где $\Psi_{0,1}^{яд}$ — в. ф. начального и конечного состояний ядра. Таким образом,

$$V_{vn} = - \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{8}\pi^2} \iint \Psi_1^{яд*} e^{-ikr_e} \sum_p \left(\frac{1}{|r_e - r_p|} - \frac{1}{r_e} \right) \Psi_0^{яд} e^{-Zr_e} d\tau dV_e,$$

где $d\tau$ — произведение дифференциалов всех координат ядра, dV_e — то же для электрона.

Для вычисления матричного элемента воспользуемся разложением кулоновского потенциала в интеграл Фурье:

$$\sum_p \frac{1}{|r_e - r_p|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d^3q}{q^2} \sum_p e^{iq \cdot (r_e - r_p)} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d^3q}{q^2} e^{iqr_e} \sum_p e^{-iqr_p},$$

так что

$$V_{vn} = - \frac{Z^{3/2}}{2^{5/2}\pi^4} \int \frac{d^3q}{q^2} \int d\tau \Psi_1^{яд*} \sum_p (e^{-iqr_p} - 1) \Psi_0^{яд} \int dV_e e^{-ikr_e + iqr_e - Zr_e}. \quad (3)$$

Легко заметить, что в интеграле (3) существенны только такие значения q , для которых $|qr_p| \ll 1$ (см. ниже). Разложив экспоненту в ряд по степеням qr_p , выполним интегрирование по переменным ядерной подсистемы:

$$\int \Psi_1^{яд*} \sum_p (e^{-iqr_p} - 1) \Psi_0^{яд} d\tau \approx \int \Psi_1^{яд*} \left(-iq \sum_p r_p \right) \Psi_0^{яд} d\tau = -iqd_{10}, \quad (4)$$

где через \mathbf{d}_{10} обозначен матричный элемент дипольного момента ядра. Проинтегрировав по координатам электрона, получаем

$$\int dV_e \exp[-ikr_e + iqr_e - Zr_e] = \frac{8\pi Z}{[Z^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2]^2},$$

и, таким образом, матричный элемент (3) приводится к виду

$$V_{\nu n} = \frac{i\sqrt{2} Z^{5/2}}{\pi^3} \mathbf{d}_{10} \int \frac{d^3q}{q^2} \frac{\mathbf{q}}{[Z^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2]^2}. \quad (5)$$

По условию задачи скорость вылетающего электрона много больше атомной, т. е. $k \gg Z$ (при этом энергия вылетающего электрона определяется δ -функцией в выражении (2) и равна $E_k = k^2/2 = E_{\text{яд}, 0} - E_{\text{яд}, 1} + E_{\text{эл}, 0} \approx E_{\text{яд}, 0} - E_{\text{яд}, 1}$). Учитывая это, замечаем, что в интеграле (5) доминирующую роль играет область $|\mathbf{q} - \mathbf{k}| \leq Z$ (и этим подтверждается использованное выше неравенство $|\mathbf{q}_\rho| \ll 1$), и поэтому он равен ($\mathbf{q} \approx \mathbf{k}$)

$$\int \frac{d^3q}{q^2} \frac{\mathbf{q}}{[Z^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2]^2} \approx \frac{\mathbf{k}}{k^2} \int d^3q \frac{1}{[Z^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2]^2} = \frac{\pi^2}{Z} \frac{\mathbf{k}}{k^2}$$

и соответственно

$$V_{\nu n} = \frac{i\sqrt{2} Z^{3/2}}{\pi k^2} \mathbf{k} \mathbf{d}_{10}. \quad (6)$$

Так как в формуле (2) $dv \equiv k^2 dk d\Omega_k = k dE_k d\Omega_k$, $E_\nu \equiv E_k + E_{\text{яд}, 1} = \frac{k^2}{2} + E_{\text{яд}, 1}$, $E_n^{(0)} \equiv E_{\text{эл}, 0} + E_{\text{яд}, 0} \approx E_{\text{яд}, 0}$, то, выполняя в ней интегрирование сначала по E_k (с учетом значения (6) матричного элемента), а затем по углам вылета электрона, получаем вероятность выбрасывания электрона в виде

$$d\omega_{\mathbf{k}} = \frac{4Z^3}{\pi} \frac{|\mathbf{k} \mathbf{d}_{10}|^2}{k^3} d\Omega_{\mathbf{k}}, \quad \omega = \frac{16Z^3}{3k} |\mathbf{d}_{10}|^2$$

(первое из этих выражений определяет угловое распределение электронов). Так как в атоме имеется два K -электрона, то полная вероятность внутренней конверсии на электронах K -оболочки равна

$$\omega_K = 2\omega = \frac{32Z^3}{3k} |\mathbf{d}_{10}|^2 = \frac{32m^3 e^6}{3\hbar^7} \frac{Z^3 e^2}{\hbar v} |\mathbf{d}_{10}|^2. \quad (7)$$

С другой стороны, вероятность дипольного излучения (см., например, 14.1)

$$\omega_{\text{изл}} = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{d}_{10}|^2, \quad (8)$$

где ω — частота излучения, $\hbar\omega = mv^2/2$.

Из (7) и (8) получаем коэффициент внутренней конверсии:

$$\beta_K \equiv \frac{\omega_K}{\omega_{\text{изл}}} = \frac{\alpha (Z\alpha)^3}{2} \left(\frac{2mc^2}{\hbar\omega} \right)^{7/2} \quad \left(\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \right).$$

11.83. Задача решается аналогично предыдущей, причем начальная стадия решения обеих задач совершенно одинакова (вплоть до формулы (4) предыдущей задачи). Однако при вычислении ядерной части матричного элемента теперь уже нельзя воспользоваться формулой (4), так как в условиях данной задачи начальное и конечное состояния ядра имеют моменты, равные нулю, и поэтому $\mathbf{d}_{10} = 0$. Беря следующий член разложения экспоненты по степеням $(\mathbf{q}\mathbf{r}_p)$, получаем ядерную часть матричного элемента в виде

$$-\frac{1}{2} \int \Psi_1^{\text{яд}*} \sum_p (\mathbf{q}\mathbf{r}_p) (\mathbf{q}\mathbf{r}_p) \Psi_0^{\text{яд}} d\tau = -\frac{q_i q_k}{2} \int \Psi_1^{\text{яд}*} \sum_p x_{pi} x_{pk} \Psi_0^{\text{яд}} d\tau \equiv \\ \equiv -\frac{1}{6} q_i q_k Q_0 \delta_{ik} = -\frac{1}{6} Q_0 q^2, \quad (1)$$

где

$$Q_0 = \int \Psi_1^{\text{яд}*} \left(\sum_p r_p^2 \right) \Psi_0^{\text{яд}} d\tau, \quad (2)$$

и соответственно матричный элемент возмущения равен

$$V_{vn} = \frac{Q_0}{12\pi^2} \int \int d^3 q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_e} \Psi_k^*(\mathbf{r}_e) \Psi_0(\mathbf{r}_e) dV_e. \quad (3)$$

Интегрирование по переменной \mathbf{q} в выражении (3) дает

$$\int d^3 q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_e} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{r}_e),$$

и, таким образом,

$$V_{vn} = \frac{2\pi}{3} \Psi_k^*(0) \Psi_0(0) Q_0 \quad (4)$$

(сравнить с выражением (6) предыдущей задачи).

Используя значение (4) матричного элемента, легко находим угловое распределение выбрасываемого электрона и полную вероятность его выбрасывания:

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{8\pi^3}{9} k |Q_0|^2 |\Psi_k^*(0) \Psi_0(0)|^2, \\ w = \frac{32\pi^4 k}{9} |Q_0|^2 |\Psi_k^*(0) \Psi_0(0)|^2 \quad (5)$$

(изотропный характер распределения $dw/d\Omega$ очевиден заранее).

Умножая (5) на 2 (в атоме два K -электрона), находим вероятность рассматриваемого $E0$ -перехода:

$$w_{E0} = \frac{64\pi^4}{9} k |Q_0|^2 |\Psi_k^*(0) \Psi_0(0)|^2 \quad (6)$$

(отметим, что при $E0$ -переходе четности начального и конечного состояний ядра должны быть одинаковыми, в противном случае $Q_0 = 0$). В частности, если выбрасываемый электрон

является быстрым: $k \gg Z$, то $\Psi_k(0) \approx (2\pi)^{-3/2}$ и формула (6) дает

$$\omega_{E0} = \frac{8kZ^3}{9} |Q_0|^2. \quad (7)$$

11.84. Гамильтониан системы, состоящей из μ -мезона и электрона (представляющего один из электронов K -оболочки), находящихся в кулоновском поле ядра с зарядом Z (используем атомную систему единиц, масса мюона $m_\mu = 207m_e = 207$ ат. ед., ядро считаем точечным и бесконечно тяжелым), имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m_\mu} \Delta_\mu - \frac{Z}{r_\mu} - \frac{1}{2} \Delta_e - \frac{Z}{r_e} + \frac{1}{|r_e - r_\mu|}. \quad (1)$$

Имея в виду, что размеры мюонной орбиты много меньше электронной, запишем гамильтониан (1) в виде $\hat{H} = \hat{H}_\mu + \hat{H}_e + \hat{V}$, где

$$\hat{H}_\mu = -\frac{1}{2m_\mu} \Delta_\mu - \frac{Z}{r_\mu}, \quad \hat{H}_e = -\frac{1}{2} \Delta_e - \frac{Z-1}{r_e}, \\ \hat{V} = \frac{1}{|r_e - r_\mu|} - \frac{1}{r_e}.$$

В пренебрежении возмущением \hat{V} рассматриваемая система представляет две независимые подсистемы: электронную и мюонную.

Легко заметить, что расчет эффекта Оже совершенно аналогичен расчету вероятности внутренней конверсии (см. 11.82), так как формально можно рассматривать мюонную подсистему как ядро. Поэтому решение данной задачи полностью дублирует решение задачи 11.83, с очевидным переобозначением Z на $Z-1$ в в. ф. K -электрона и с подстановкой мюонных в. ф. начального и конечного состояний вместо ядерных в. ф. $\Psi_{0,1}^{\pi, \lambda}$.

Приведем окончательный ответ для вероятности дипольного (P -) эффекта Оже (в единицу времени) с учетом наличия двух K -электронов (сравнить с формулой (7) задачи 11.82):

$$\omega_P = \frac{32}{3} \frac{m^3 e^6}{\hbar^7} \frac{(Z-1)^3 e^2}{\hbar v} |d_{10}|^2, \quad (2)$$

где v — скорость вылетающего электрона, d_{10} — матричный элемент дипольного момента мюона. В частности, для мюонного перехода $2p \rightarrow 1s$ имеем $|d_{10}| = 4\sqrt{2} (2/3)^5 \hbar^2 / Ze^2 m_\mu$, $v = (3Z^2 e^4 m_\mu / 4m \hbar^2)^{1/2}$.

Так как размеры мюонной орбиты в состоянии с главным квантовым числом n имеют величину порядка $a_{\mu n} \sim n^2 / Z m_\mu$ ат. ед., а размеры орбиты K -электрона порядка $1/Z$, то условие применимости выражения (2) определяется неравенством $n^2 \ll m_\mu \approx 200$; при выполнении этого условия скорость выбрасываемых электронов много больше атомной.

11.85. Если дипольный переход Оже аналогичен процессу внутренней конверсии при дипольном переходе ядра (см. 11.84), то S -переход Оже в случае, когда начальное и конечное состояния мюона имеют орбитальный момент $l=0$, является аналогом конверсии при $E0$ -переходе в ядре (см. 11.83).

Точно так же, как решение предыдущей задачи дублировало решение 11.82, так и решение данной задачи дублирует решение 11.83.

Окончательное выражение для вероятности рассматриваемого перехода имеет вид (с учетом наличия двух K -электронов)

$$w_{S(0 \rightarrow 0)} = \frac{8k(Z-1)^3}{9} |Q_0|^2, \quad (1)$$

где

$$Q_0 = \int \Psi_{n,00}^*(r_\mu) r_\mu^2 \Psi_{n,00}(r_\mu) dV_\mu$$

(сравнить с формулами (7), (2) задачи 11.83).

Учитывая явный вид в. ф. Ψ_{nlm} водородоподобного мезоатома, находим для мюонного перехода $2s \rightarrow 1s$ значение $Q_0 = -16\sqrt{2}(2/3)^5 Z^{-2} m_\mu^{-2}$, а так как при этом $k = (3Z^2 m_\mu/4)^{1/2}$, то (1) принимает вид

$$\begin{aligned} w_{S(2s \rightarrow 1s)} &= \frac{2^{21}}{\sqrt{3} 3^{11}} \frac{(Z-1)^3}{Z^3} \frac{1}{m_\mu^{7/2}} \text{ ат. ед.} = \\ &= \frac{2^{21}}{\sqrt{3} 3^{11}} \frac{(Z-1)^3}{Z^3} \left(\frac{m_e}{m_\mu}\right)^{7/2} \frac{m_e e^4}{\hbar^3} \sim 10^9 \text{ с}^{-1}. \end{aligned}$$

Г л а в а 12

АТОМНОЕ ЯДРО

12.1. $U_{\text{кул}} = \frac{e^2}{R_0} \equiv \frac{e^2}{a_0} \frac{a_0}{R_0} \approx 0,7 \text{ МэВ} \ll U_0 \approx 40 \text{ МэВ}$ ($a_0 \approx 0,5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ — боровский радиус, $e^2/a_0 \approx 27 \text{ эВ}$).

Для оценки энергии взаимодействия спиновых магнитных моментов двух нуклонов воспользуемся известной из классической электродинамики формулой для энергии взаимодействия двух магнитных моментов:

$$U_{\text{магн}} = \frac{(\mu_1 \mu_2) R^2 - 3(\mu_1 \mathbf{R})(\mu_2 \mathbf{R})}{R^5}.$$

Учитывая, что характерная величина магнитного момента нуклона (как протона, так и нейтрона) порядка $\mu_N \sim e\hbar/Mc$ (M — масса протона), находим

$$\begin{aligned} U_{\text{магн}} &\sim \frac{\mu_N^2}{R_0^3} \sim \frac{e^2 \hbar^2}{M^2 c^2 R_0^3} \equiv \frac{e^2 \hbar^2}{m_e a_0^3} \frac{1}{M} \frac{1}{Mc^2} \frac{a_0^3}{R_0^3} \approx \\ &\approx 10^{-2} \text{ МэВ} \ll U_0 \quad (Mc^2 \approx 938 \text{ МэВ}). \end{aligned}$$

12.2. Магнитным моментом μ_0 некоторой системы, характеризующейся полным моментом J (и другими квантовыми числами), по определению называют среднее значение $\bar{\mu}_z$, где $\hat{\mu}$ — оператор магнитного момента системы, в состоянии с $J_z = J$, т. е.

$$\mu_0 = \langle J, J_z = J | \hat{\mu}_z | J, J_z = J \rangle, \text{ при этом } \bar{\mu}_x = \bar{\mu}_y = 0. \quad (1)$$

В рассматриваемом случае

$$\hat{\mu} = \hat{\mu}_{\text{орб}} + \hat{\mu}_{\text{сп}} = \frac{\hat{L}}{2} + \mu_p \hat{\sigma}_p + \mu_n \hat{\sigma}_n = \frac{\hat{L}}{2} + (\mu_p + \mu_n) \hat{S} + \frac{\mu_p - \mu_n}{2} (\hat{\sigma}_p - \hat{\sigma}_n) \quad (2)$$

(магнитные моменты выражаются в ядерных магнетонах; 1 яд. маг. = $e\hbar/2Mc$; появление коэффициента $1/2$ в выражении для $\hat{\mu}_{\text{орб}}$ связано с тем, что в дейтроне орбитальные моменты протона и нейтрона одинаковы и составляют половину орбитального момента относительного движения, так что $\hat{L}/2$ представляет оператор орбитального магнитного момента протона в дейтроне (в яд. маг.)).

В 1L -состояниях (т. е. в случае равного нулю суммарного спина нейтрона и протона, $S = 0$), очевидно, $\bar{S} = \bar{\sigma}_p = \bar{\sigma}_n = 0$, $J \equiv L$, так что согласно (1) и (2) имеем $\mu({}^1L) = L/2$. В частности,

$$\mu({}^1S_0) = 0, \quad \mu({}^1P_1) = 1/2, \quad \mu({}^1D_2) = 1 \quad \text{и т. д.}$$

Для вычисления магнитных моментов триплетных по спину (т. е. $S = 1$) 3L_J -состояний системы протон — нейтрон замечаем, что для таких состояний $(\hat{\sigma}_p - \hat{\sigma}_n) = 0$ (спиновая функция состояния с $S = 1$ симметрична, а оператор $(\hat{\sigma}_p - \hat{\sigma}_n)$ антисимметричен по отношению к перестановке спиновых переменных протона и нейтрона), так что из (1) и (2) следует

$$\mu({}^3L_J) = \langle J, J_z = J, L, S | \frac{1}{2} \hat{L}_z + (\mu_p + \mu_n) \hat{S}_z | J, J_z = J, L, S \rangle. \quad (3)$$

Воспользовавшись результатом задачи 3.54, (3) легко преобразовать к виду

$$\mu({}^3L_J) = \frac{1}{2(J+1)} \{1,38J(J+1) - 0,38[L(L+1) - 2]\} \quad (4)$$

(в (4) учтено, что $S = 1$, и подставлены численные значения μ_p, μ_n).

Согласно (4) имеем

$$\mu({}^3S_1) = 0,88; \quad \mu({}^3P_1) = 0,69; \quad \mu({}^3P_0) = 0; \quad \mu({}^3D_1) = 0,31.$$

12.3. Характерной особенностью дейтрона является малая величина энергии связи протона и нейтрона. Действительно, $\epsilon_d = 2,2$ МэВ много меньше величины $\hbar^2/\mu R_0^2 \approx 20$ МэВ ($\mu =$

$=M/2$, M — масса нуклона, $R_0 \approx 2 \cdot 10^{-13}$ см — радиус действия ядерных сил). Это означает, что с большой вероятностью протон и нейтрон в дейтроне находятся вне области действия ядерных сил, и в. ф. системы может быть представлена в виде (сравнить с 2.9)

$$\Psi \approx \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \chi, \quad \kappa = \sqrt{\frac{M\epsilon_d}{\hbar^2}}, \quad (1)$$

где χ — спиновая в. ф. Выражение (1) для в. ф. заведомо неприменимо в области действия сил, однако рассматриваемое приближение основано как раз на возможности пренебрежения вкладом в нормировочный интеграл $\int |\Psi|^2 dV$ области, где действуют силы, как для точной в. ф. (неизвестной!), так и для приближенной (1) (в последнем случае этот вклад читателю предлагается оценить самостоятельно). Имеем

$$\bar{r}^k = \int \Psi^* r^k \Psi dV = \frac{\kappa}{2\pi} \int r^{k-2} e^{-2\kappa r} r^2 dr d\Omega = \frac{1}{(2\kappa)^k} \Gamma(k+1).$$

Численные значения:

$$\frac{1}{2\kappa} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{M\epsilon_d}} \equiv \frac{a_0}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} \frac{m_e}{M} \frac{1}{\epsilon_d}} \approx 2,2 \cdot 10^{-13} \text{ см},$$

$$\bar{r} \approx 2,2 \cdot 10^{-13} \text{ см}, \quad \bar{r}^2 \approx 10^{-25} \text{ см}^2 \quad (2)$$

($\hbar^2/m_e a_0^2 \approx 27$ эВ, $a_0 \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ см).

12.4. Квадрупольным моментом Q_0 ядра в состоянии, характеризующемся полным моментом J (и другими квантовыми числами), по определению называется среднее значение (суммирование проводится по всем протонам ядра)

$$Q_0 = \langle J, J_z = J | \sum_p (3z_p^2 - r_p^2) | J, J_z = J \rangle. \quad (1)$$

Для системы из протона и нейтрона, находящейся в 1P_1 -состоянии, выражение (1) принимает вид

$$Q_0({}^1P_1) = \frac{1}{4} \int \Psi^* (3z^2 - r^2) \Psi dV, \quad (2)$$

где $\Psi \equiv \Psi_{J=L-1, J_z=L_z-1, S=0} = f(r) Y_{11}(\mathbf{n}) \chi_{S=0}$ — нормированная в. ф. рассматриваемого состояния, $\chi_{S=0}$ — спиновая в. ф., $\chi_{S=0}^* \chi_{S=0} = 1$, $r_p = r/2$.

Записав $(3z^2 - r^2) = r^2(3 \cos^2 \theta - 1)$ и выполнив интегрирование по углам:

$$\int (3 \cos^2 \theta - 1) |Y_{11}|^2 d\Omega = \frac{3}{8\pi} \int (3 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta d\Omega = -\frac{2}{5},$$

приводим выражение (2) к виду

$$Q_0(^1P_1) = -\frac{1}{10} \bar{r}^2, \quad (3)$$

где $\bar{r}^2 = \int \Psi^* r^2 \Psi dV > 0$.

Квадрупольный момент протон-нейтронной системы в состояниях 1S_0 , 3S_1 , 3P_0 , очевидно, равен нулю, так как средняя плотность заряда в таких состояниях является сферически симметричной.

12.5. Квадрупольный момент рассчитывается по формуле (2) предыдущей задачи, в которой теперь под в. ф. Ψ следует понимать в. ф. состояния с $J = L = S = 1$, $J_z = 1$. Она имеет вид $\Psi = f(r) \tilde{\Psi}_{J=L=S=1, J_z=1}$, где

$$\tilde{\Psi}_{J=L=S=1, J_z=1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ Y_{11}(\mathbf{n}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - Y_{10}(\mathbf{n}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} \quad (1)$$

— спин-угловая часть в. ф. рассматриваемого состояния,

$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ — спиновая в. ф. состояния двух нуклонов с $S = 1$ в S_z -представлении. При определении явного вида (1) были использованы коэффициенты Клебша — Гордана.

Отметим, что спин-угловую зависимость в. ф. состояния с $J = L = S = 1$ можно записать в изящной форме:

$$\tilde{\Psi}_{J=L=S=1} = C(\hat{\mathbf{S}}\mathbf{n})\chi, \quad |C|^2 = \frac{3}{8\pi}, \quad (2)$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $\hat{\mathbf{S}}$ — оператор суммарного спина $S = 1$; при $\chi^*\chi = \mathbf{1}$ и указанном значении $|C|^2$ в. ф. (2) нормирована на единицу. Для того чтобы в. ф. (2) описывала состояние с $J_z = 1$, следует

выбрать $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ (см. в связи с этим 12.15).

После установления вида в. ф. рассматриваемого состояния не представляет труда найти

$$Q_0(^3P_1) = \frac{1}{20} \bar{r}^2. \quad (3)$$

Подчеркнем, что установленные значения квадрупольных моментов состояний 1P_1 и 3P_1 различаются знаком. Оценка ожидаемых численных значений Q_0 для рассматриваемых состояний дейтрона может быть получена, если воспользоваться значением $\bar{r}^2 \approx 10^{-25} \text{ см}^2$ (сравнить с 12.3).

12.6. Изотопический спин является векторной величиной в абстрактном трехмерном пространстве изотопического спина, формальные свойства которого аналогичны свойствам момента (или спина) в обычном трехмерном пространстве.

Изотопический спин нуклона $t_N \equiv \tau = 1/2$. В роли операторов компонент изоспина нуклона $\hat{\tau}$ выбирают матрицы (сравнить со случаем $s = 1/2$ обычного спина)

$$\hat{\tau}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

При этом физические состояния нуклона — протон и нейтрон — описываются с. ф. оператора $\hat{\tau}_3$, так что *)

$$\psi_p \equiv \psi_{\tau_3=+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_n \equiv \psi_{\tau_3=-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

а с. з. $\tau_3 = \pm 1/2$ определяют электрический заряд частицы $q = 1/2(1 + 2\tau_3)$ (в единицах e заряда протона).

Имея в виду аналогию свойств изоспина и обычного спина и результат задачи 5.17, легко находим вид изоспиновых в. ф. Ψ_{TT} двухнуклонной системы, отвечающих определенным значениям суммарного изоспина T и его проекции T_3 :

$$\Psi_{1,1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \equiv \psi_p(1) \psi_p(2),$$

$$\Psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_p(1) \psi_n(2) + \psi_n(1) \psi_p(2) \},$$

$$\Psi_{1,-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \equiv \psi_n(1) \psi_n(2),$$

$$\Psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_p(1) \psi_n(2) - \psi_n(1) \psi_p(2) \}.$$

Отметим, что в состояниях с определенным значением T и $T_3 = 0$ каждый из нуклонов не находится в определенном зарядовом состоянии, а с вероятностью $1/2$ может находиться как в протонном, так и в нейтронном состояниях.

12.7. Имея в виду изотопическую симметрию ядерных сил, протон и нейтрон следует рассматривать как тождественные частицы — нуклоны, находящиеся в различных зарядовых состояниях, отличающихся значением t_3 -компоненты изоспина. Так как нуклон является фермионом, то в. ф. системы нуклонов должна быть антисимметрична по отношению к перестановке всех переменных — пространственных, спиновых и изоспиновых — любых двух нуклонов (обобщенный принцип Паули).

Так как для системы из двух нуклонов:

а) перестановка пространственных координат эквивалентна отражению координат относительно центра масс системы и поэтому симметрия координатных функций с данным L совпадает с четностью $(-1)^L$,

*) В литературе используется также и «обращенная» классификация, при которой $\tau_3 = +1/2$ соответствует нейтрону, а $\tau_3 = -1/2$ — протону.

б) симметрия спиновой функции, отвечающей состоянию с суммарным спином S , относительно перестановки спиновых переменных определяется множителем $(-1)^{S+1}$,

в) симметрия изоспиновой в. ф., аналогично спиновой, определяется множителем $(-1)^{T+1}$,

то в. ф. состояния системы из двух нуклонов Ψ_{LST} с определенными значениями L, S, T при перестановке переменных нуклонов умножается на $(-1)^{L+S+T}$, так что требование антисимметричности в. ф. дает

$$(-1)^T = (-1)^{L+S+1}. \quad (1)$$

Соотношение (1) определяет возможные значения T (0 или 1) в состояниях с данными L и S . Так, в случае $S = 1$ и четного L (как, например, у дейтрона) изоспин двух нуклонов равен $T = 0$ и т. д.

Изоспиновая часть в. ф. дейтрона, имеющего $T = 0$, приведена в предыдущей задаче (функция $\Psi_{0,0}$).

12.8. Искомый оператор, являющийся скаляром в изотопическом пространстве, может выражаться только через следующие скалярные операторы:

$$1, \hat{\tau}_1^2, (\hat{\tau}_1^2)^2, \dots, \hat{\tau}_2^2, (\hat{\tau}_2^2)^2, \dots, (\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2), (\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2)^2, \dots \quad (1)$$

($\hat{\tau}_{1,2}$ — операторы изоспина отдельных нуклонов).

Легко, однако, заметить, что из всех операторов в (1) независимыми являются только два: 1 и $(\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2)$. Действительно, $\hat{\tau}_1^2 = \hat{\tau}_2^2 = 3/4$, т. е. они кратны единичному оператору, а оператор $(\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2)^2$ линейно выражается через 1 и $(\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2)$:

$$(\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2)^2 = 3/16 - 1/2 (\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2)$$

(сравнить с 5.20).

Соответственно наиболее общий вид оператора \hat{U} двухнуклонного взаимодействия, сохраняющего изоспин (точнее, являющегося изотопически-инвариантным), следующий:

$$\hat{U} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 (\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2), \quad (2)$$

где $\hat{V}_{1,2}$ — не зависящие от изоспиновых переменных операторы (они — операторы в координатном и спиновом пространствах, симметричные относительно перестановки нуклонов).

Так как оператор $(\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2)$ в состоянии с определенным значением суммарного изоспина T также имеет определенное значение, равное

$$\text{с. з. } (\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2) = \begin{cases} 1/4 & \text{в состоянии с } T = 1, \\ -3/4 & \text{в состоянии с } T = 0, \end{cases}$$

то легко заметить, что операторы нуклон-нуклонного взаимодействия в состоянии с определенным значением $T = 0; 1$

следующим образом выражаются через операторы \hat{V}_1, \hat{V}_2 , входящие в (2)

$$U(T=0) = \hat{V}_1 - 3/4 \hat{V}_2, \quad U(T=1) = \hat{V}_1 + 1/4 \hat{V}_2.$$

Не представляет также труда выразить операторы V через $\hat{U}(T=0; 1)$ и записать (2) в виде

$$\hat{U} = (\hat{U}_0 + 3\hat{U}_1)/4 + (\hat{U}_1 - \hat{U}_0)(\hat{\tau}_1 \hat{\tau}_2), \quad \hat{U}_{0,1} \equiv \hat{U}(T=0; 1).$$

12.9. В двухнуклонной системе кулоновское взаимодействие отлично от нуля лишь в случае, когда оба нуклона находятся в протонном (по изоспину) состоянии.

Имея в виду связь оператора заряда нуклона с оператором его t_3 -компоненты

$$\hat{q} = \frac{e}{2} (1 + 2\hat{t}_3),$$

нетрудно сообразить, что искомым оператор кулоновского взаимодействия можно записать в виде

$$\hat{U}_{\text{кул}} = \frac{e^2}{4|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} (1 + 2\hat{t}_3^{(1)})(1 + 2\hat{t}_3^{(2)}).$$

12.10. Система из двух протонов, как и из двух нейтронов, имеет изотопический спин $T=1$. Поэтому существование связанного состояния в таких системах означало бы существование его в состоянии с $T=1$. Такое состояние с $T=1, T=0$ должно было бы проявиться и в системе «протон + нейтрон». Но из эксперимента следует, что единственное связанное состояние в системе «протон + нейтрон» — дейтрон — имеет изоспин $T=0$ (см., например, 12.7), так что связанного состояния с $T=1$ не существует, что и доказывает утверждение задачи.

Подготовленному читателю предлагается самостоятельно обсудить вопрос о критичности результата задачи возможному слабому нарушению изотопической инвариантности ядерных сил, имея в виду, что в системе «протон + нейтрон» имеется мелкий виртуальный уровень в состоянии с $T=1$.

12.11. Имея в виду результат задачи 12.7, замечаем, что система «протон + нейтрон» в состояниях 3P_1 и 1P_1 имеет различные значения изоспина (соответственно $T=1$ и $T=0$). Это означает, что взаимодействие, приводящее к рассматриваемому состоянию — суперпозиции ${}^1P_1 + {}^3P_1$, не сохраняет изотопический спин, т. е. не является изотопически инвариантным.

Так как в состоянии ${}^1P_1 + {}^3P_1$ суммарный спин (обычный) также не имеет определенного значения, то взаимодействие, приводящее к такому состоянию, не сохраняет и спин. В качестве примера такого взаимодействия можно указать

$$\hat{U} = V(r)(\hat{\sigma}_p - \hat{\sigma}_n) \cdot \hat{1}. \quad (1)$$

Из (1) непосредственно видно, почему это взаимодействие противоречит изотопической инвариантности: при перестановке двух нуклонов (протона и нейтрона) оно меняет знак.

12.12. Если оба нуклона являются либо протонами, либо нейтронами, то в таких зарядовых состояниях двухнуклонной системы взаимодействие одинаково и описывается оператором

$$\hat{U}_{pp} = \hat{U}_{nn} = \hat{V}_1 + 1/4 \hat{V}_2. \quad (1)$$

Для системы же «протон + нейтрон»

$$\hat{U}_{pn} = \hat{V}_1 - 1/4 \hat{V}_2. \quad (2)$$

Различие (1) и (2) отражает то обстоятельство, что рассматриваемое взаимодействие не является изотопически инвариантным (в изопространстве оно представляет суперпозицию скаляра \hat{V}_1 и компоненты тензора $\hat{V}_2 \hat{\tau}_3^{(1)} \hat{\tau}_3^{(2)}$, т. е. не является изо-скаляром, как это требуется для выполнения изотопической инвариантности).

В то же время равенство $\hat{U}_{pp} = \hat{U}_{nn}$ свидетельствует о зарядовой независимости рассматриваемого взаимодействия.

12.13. Совокупность экспериментальных данных о свойствах дейтрона свидетельствует о том, что его состояние представляет суперпозицию ${}^3S_1 + {}^3D_1$, так что орбитальный момент L не имеет определенного значения, как это должно было бы быть для не зависящих от спина центральных сил.

Легко заметить, однако, что из трех приведенных в условии задачи потенциалов только третий, описывающий тензорные силы, может привести к указанному выше состоянию дейтрона (суперпозиция S - и D -волн).

Действительно, первый из потенциалов является центральным, хотя интенсивность взаимодействия и зависит от значения S суммарного спина:

$$\hat{U}_S = \begin{cases} -3V(r) & \text{в состоянии с } S=0, \\ V(r) & \text{в состоянии с } S=1. \end{cases}$$

Для этого потенциала интегралами движения являются орбитальный момент \mathbf{L} и суммарный спин \mathbf{S} в отдельности.

Второй потенциал не сохраняет в отдельности \mathbf{L} и \mathbf{S} , а сохраняет только суммарный момент $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Тем не менее он, как и первый из потенциалов, не может привести к наблюдаемому состоянию дейтрона (суперпозиции S - и D -волн). Это связано с тем, что, хотя для такого потенциала сами векторы \mathbf{L} и \mathbf{S} не сохраняются, квадраты этих векторов являются интегралами движения (операторы $\hat{\mathbf{L}}^2$ и $\hat{\mathbf{S}}^2$ коммутируют с оператором взаимодействия).

Что касается последнего потенциала, то он не сохраняет ни вектора \mathbf{L} , ни \mathbf{L}^2 и поэтому используется для объяснения

(наряду с центральным потенциалом) экспериментальных данных о дейтроне. Отметим, что потенциал тензорных сил, не сохраняя \mathbf{S} , все же сохраняет \mathbf{S}^2 .

Все рассматриваемые потенциалы сохраняют как полный момент \mathbf{J} (и соответственно \mathbf{J}^2), так и четность.

12.14. Воспользовавшись известной формулой

$$E_0^{(1)} = \int \Psi_0^* \hat{V} \Psi_0 d\tau, \quad \Psi_0 = \psi_0(r) \chi_S$$

(χ_S — спиновая часть в. ф., отвечающая определенному значению суммарного спина S ; фактически речь идет о состоянии с $S = 1$, так как при $S = 0$ тензорные силы тождественно равны нулю), перепишем ее в виде ($\hat{V} \equiv \hat{O}_T$)

$$E_0^{(1)} = \int V(r) \psi_0^*(r) [6n_i n_k - 2\delta_{ik}] \psi_0(r) dv \chi_S^* \hat{S}_i \hat{S}_k \chi_S. \quad (1)$$

Очевидно,

$$\int V(r) |\psi_0(r)|^2 (6n_i n_k - 2\delta_{ik}) dv \equiv C \delta_{ik} \quad (2)$$

(при этом существенно, что в. ф. $\psi_0(r)$ сферически симметрична, так как для невозмущенного состояния $L = 0$). Произведя в (2) свертку по индексам i и k , находим $C = 0$ и соответственно, согласно (1) и (2), получаем $E_0^{(1)} = 0$.

12.15. Задача состоит в доказательстве утверждения, что приведенная в. ф. представляет наиболее общий вид функции, отвечающей состоянию дейтрона в виде суперпозиции ${}^3S_1 + {}^3D_1$. Докажем это.

Прежде всего отметим очевидный факт, что в. ф.

$$\Psi_1 = f_0(r) \chi \quad (1)$$

описывает состояние с $L = 0$ (в. ф. сферически симметрична), $S = 1$ и, таким образом, отвечает суммарному моменту $J = 1$, т. е. представляет 3S_1 -состояние.

Докажем, что в. ф.

$$\Psi_2 = f_1(r) \hat{S}_{12} \chi \equiv f_1(r) \{6(\hat{\mathbf{S}}\mathbf{n})^2 - 2\hat{\mathbf{S}}^2\} \chi \quad (2)$$

отвечает следующим квантовым числам: $S = 1$ (очевидное утверждение), $L = 2$ и $J = 1$, т. е. описывает 3D_1 -волну в дейтроне. Запишем (2) в виде

$$\Psi_2 = f_1(r) \{6n_i n_k - 2\delta_{ik}\} \hat{S}_i \hat{S}_k \chi. \quad (3)$$

Угловая часть этой в. ф. $T_{ik} = 6n_i n_k - 2\delta_{ik}$ является симметричным тензором второго ранга с равным нулю следом, $T_{ii} = 0$, так что на основании результата задачи 3.57 (см. также 3.68) можно утверждать, что в. ф. (2) действительно описывает состояние с орбитальным моментом $L = 2$.

Осталось доказать, что в. ф. (2) отвечает суммарному моменту $J = 1$. Подействуем на функцию Ψ_2 оператором $\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}})^2$:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \Psi_2 \equiv \hat{f}_i \hat{f}_i f_1(r) \hat{S}_{12} \chi. \quad (4)$$

Так как оператор $f_1(r) \hat{S}_{12}$ является оператором скалярной величины, то он, очевидно, коммутирует с операторами компонент момента

$$[\hat{J}_i, f_1(r) \hat{S}_{12}] = 0,$$

а соответственно и с оператором $\hat{\mathbf{J}}^2$, так что (4) можно записать в виде

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \Psi_2 = f_1(r) \hat{S}_{12} \hat{\mathbf{J}}^2 \chi. \quad (5)$$

Далее, так как χ не зависит от углов и поэтому $L_i \chi \equiv 0$, то

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \chi = (\hat{\mathbf{L}}^2 + 2\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}^2) \chi = \hat{\mathbf{S}}^2 \chi = 2\chi.$$

Соответственно, учитывая (5) и (2), находим $\hat{\mathbf{J}}^2 \Psi_2 = 2\Psi_2$, т. е. в. ф. Ψ_2 действительно описывает состояние с $J = 1$ (и с $L = 2$, $S = 1$).

Наконец, выбрав χ в виде χ_{S_z} , т. е. с. ф. оператора S_z , легко убеждаемся в том, что

$$\hat{J}_z \Psi_1 = S_z \Psi_1, \quad \hat{J}_z \Psi_2 = S_z \Psi_2,$$

т. е. при таком выборе χ рассматриваемая в. ф. $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ является с. ф. оператора J_z , отвечающей с. з. $J_z = S_z$.

В заключение отметим, что имеет место равенство

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \int \Psi^* \hat{\mathbf{J}} \Psi d\tau \equiv \chi^* \hat{\mathbf{S}} \chi \quad (\chi^* \chi = 1).$$

12.16. Записав в. ф. дейтрона в виде $\Psi = \Psi_S + \Psi_D$, причем

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 1, \quad \int |\Psi_S|^2 d\tau = 1 - w, \quad \int |\Psi_D|^2 d\tau = w$$

(конкретный вид в. ф. $\Psi_{S,D}$ рассмотрен в 12.15), легко найти

$$\bar{\mu} = \int \Psi_S^* \hat{\mu} \Psi_S d\tau + \int \Psi_D^* \hat{\mu} \Psi_D d\tau. \quad (1)$$

При этом учтено, что интерференционные члены в (1) равны нулю:

$$\int \Psi_S^* \hat{\mu} \Psi_D d\tau = \int \Psi_D^* \hat{\mu} \Psi_S d\tau = 0 \quad (2)$$

(равенства (2) представляются очевидными, если иметь в виду явный вид $\hat{\mu}$, см. 12.2, ортогональность в. ф. $\int \Psi_S^* \Psi_D d\tau = 0$ и условие $\hat{\mathbf{L}} \Psi_S \equiv 0$).

Непосредственным следствием (1) и является приведенное в условии задачи выражение для μ_d .

В случае квадрупольного момента ситуация иная, так как интерференционный член отличен от нуля.

$$1/4 \left\{ \int \Psi_S^* (3z^2 - r^2) \Psi_D d\tau + \int \Psi_D^* (3z^2 - r^2) \Psi_S d\tau \right\} \neq 0 \quad (3)$$

(сравнить с 12.4).

Более того, имея в виду малость примеси D -волны дейтроне, следует ожидать, что ее вклад в квадрупольный момент

$$1/4 \int \Psi_D^* (3z^2 - r^2) \Psi_D d\tau$$

будет существенно меньше интерференционного слагаемого (3). Знак последнего зависит от характера тензорных сил (притяжение или отталкивание). Как показывает более детальный анализ, тензорные силы носят характер притяжения.

12.17. Если бы изотопическая инвариантность ядерных сил была строгим законом природы (фактически в данной задаче речь идет о более низкой форме симметрии ядерных сил — их зарядовой независимости), то все свойства ядер трития и гелия ^3He : их массы (как и массы протона и нейтрона), энергетические уровни и их квантовые числа — были бы одинаковыми и β -распад был бы запрещен законом сохранения энергии. Нарушение этой инвариантности, проявляющееся в различии масс M_n и M_p , связано с электромагнитным взаимодействием и является незначительным.

Нарушение зарядовой независимости ядерных сил проявляется и в различии масс ядер ^3H и ^3He и, соответственно, энергий покоя (Mc^2) этих ядер. Это различие связано с двумя факторами: разницей масс M_n и M_p и энергией кулоновского взаимодействия протонов в ядре ^3He . Очевидно,

$$[M(^3\text{H}) - M(^3\text{He})] c^2 = (M_n - M_p) c^2 - \int \Psi^* \frac{e^2}{r} \Psi d\tau, \quad (1)$$

где Ψ — в. ф. ядра ^3He , $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{p_1} - \mathbf{r}_{p_2}$.

Так как

$$m_e c^2 + \epsilon_0 = [M(^3\text{H}) - M(^3\text{He})] c^2, \quad (2)$$

то согласно (1) и (2) находим

$$\frac{1}{r} = \frac{(M_n - M_p) c^2 - m_e c^2 - \epsilon_0}{e^2/a_0} \frac{1}{a_0} \approx \frac{1}{1,9 \cdot 10^{-13}} \text{ см}^{-1} \quad (3)$$

($a_0 = 0,53 \cdot 10^{-8}$ см — боровский радиус, $e^2/a_0 \approx 27$ эВ).

Полученное значение (3) дает оценку размеров рассматриваемых ядер: $R \approx [1/r]^{-1} \approx 1,9 \cdot 10^{-13}$ см.

12.18. Имея в виду общие соображения, высказанные при решении предыдущей задачи, и учитывая значение $U_{\text{кул}} = = 3(Ze)^2/5R$ электростатической энергии равномерно заряженного шара (заряд Ze) радиуса R , легко приходим к соотношению

$$\epsilon_0 = -\Delta + \frac{3(2Z+1)e^2}{5r_0(2Z+1)^{1/3}}, \quad (1)$$

где $\Delta = (M_n - M_p)c^2 \approx 1,29$ МэВ, а последнее слагаемое представляет разность $U_{\text{кул}}$ для двух шаров радиуса $R = r_0 A^{1/3}$ с зарядами $(Z+1)e$ и Ze соответственно, $A = 2Z+1$.

Из (1) следует

$$r_0 = \frac{3(2Z+1)e^2}{5(\epsilon_0 + \Delta)(2Z+1)^{1/3}}. \quad (2)$$

Численное значение (2), основанное на данных о β -распаде ^{27}Si , составляет $r_0 \approx 1,6 \cdot 10^{-13}$ см.

12.19.

$$r_0 = \frac{3(2Z-1)e^2}{5(\epsilon_0 + \Delta)A^{1/3}} \approx 1,3 \cdot 10^{-13} \text{ см.} \quad (1)$$

В (1) A и Z — общее число нуклонов и протонов в распадающемся ядре, так что для рассматриваемого распада $A = 34$, $Z = 17$.

12.20. Задача о нахождении одночастичных энергетических уровней и соответствующих им. с. ф. из у. Ш.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta - U_0 + \frac{1}{2} kr^2 \right\} \Psi = E\Psi$$

фактически была решена ранее (см. 4.23 и 4.25).

Уровни энергии определяются выражением $E_N = \hbar\omega(N + 3/2)$; $\omega = \sqrt{k/M}$, $N = 2n_r + l$, $N = 0, 1, 2$. Каждому уровню с данным N отвечают одночастичные состояния с орбитальным моментом $l = N, N-2, \dots, 1(0)$, т. е. имеется случайное вырождение. Кратность вырождения уровня равна $G(N) = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$.

На рис. 32 изображена картина одночастичных уровней для рассматриваемого потенциала. Сбоку указаны следующие числа. $G(N)$ — кратность вырождения уровня; $n(N) = 2G(N)$ — максимальное число нуклонов определенного зарядового состояния (т. е. либо протонов, либо нейтронов), которые могут одновременно находиться на соответствующем уровне (удвоение по сравнению с $G(N)$ связано со спиновой степенью свободы); $M(N)$ — максимальное число нуклонов определенного зарядового состояния, которые могут быть размещены по всем оболочкам, начиная с нижней и кончая рассматриваемой, очевидно, $M(N+1) = M(N) + n(N+1)$.

Найденные числа $M(N)$, отвечающие числам нуклонов, которым соответствуют полностью заполненные оболочки (начиная с нижней): 2, 8, 20, 40, 70, 112, 168, ... представляют значения магических чисел для рассматриваемой модели.

Специфической особенностью рассматриваемого осцилляторного потенциала является случайное вырождение уровней. Если

N		$G(N)$	$n(N)$	$M(N)$
6	———— 4s, 3d, 2g, 1i	28	56	168
5	———— 3p, 2f, 1h	21	42	112
4	———— 3s, 2d, 1g	15	30	70
3	———— 2p, 1f	10	20	40
2	———— 2s, 1d	6	12	20
1	———— 1p	3	6	8
0	———— 1s	1	2	2

Рис. 32.

этот потенциал слегка изменить, то случайное вырождение снимется, что приведет к расщеплению уровней (каждый уровень расщепится на столько подуровней, сколько различных значений l отвечает невозмущенному уровню, характеризующемуся квантовым числом N). Это обстоятельство иллюстрируется рисунком 33, на котором схематически изображена картина рас-

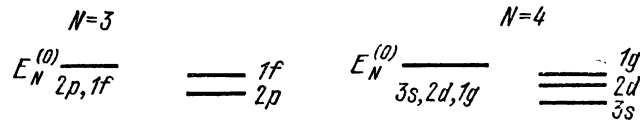


Рис. 33.

щепления уровней невозмущенного гамильтониана для значений $N=3$ и $N=4$. То, в каком порядке располагаются подуровни по значениям l , зависит от конкретного вида δU . Читателю предлагается самостоятельно обсудить особенности расщепления в случае, когда возмущение $\delta U(r)$ характеризуется малым радиусом.

В рассматриваемой модели, не учитывающей спин-орбитального взаимодействия, предсказания значений полных моментов J основных состояний ядер носят весьма неопределенный характер ввиду большой кратности вырождения уровней по J . Легко сообразить, однако, что предсказание четности — вполне определенное, что связано с тем обстоятельством, что четность одночастичных состояний $(-1)^l$ в рассматриваемой модели равна $(-1)^N$, а четность — мультипликативное квантовое число. Так,

для основного состояния ядра ${}^{11}_5\text{B}$ модель предсказывает отрицательную четность, для ядра ${}^{17}_8\text{O}$ — положительную и т. д.

12.21. Для частицы со спином в случае произвольного центрального потенциала энергетические уровни не зависят от ее спинового состояния и определяются лишь квантовыми числами n_r, l (но не l_z, s_z). Соответственно уровень (для $s = 1/2$) имеет кратность вырождения $2(2l + 1)$ (для рассматриваемого осцилляторного потенциала имеет место случайное вырождение, так как $E_{n_r, l} \equiv E(2n_r + l) \equiv E_N$).

При наличии спин-орбитального взаимодействия уровень с данным значением l расщепляется на два уровня, отвечающих значениям $j = l + 1/2$ и $j = l - 1/2$ полного момента частицы (за исключением уровней с $l = 0$). В этом случае «хорошими» квантовыми числами являются: полный момент j , его проекция j_z , а также четность (а с нею и орбитальный момент l , так как \hat{l}^2 , но не проекции l_i , коммутирует с гамильтонианом). Соответственно с. ф. гамильтониана могут быть представлены в виде

$$\Psi_E(r) = f(r) \Psi_{ll_z}(n),$$

где спин-угловые функции Ψ_{ll_z} обсуждались в 5.41 и 5.42.

Решение поставленной задачи легко получить, если заметить, что оператор $\hat{l}\hat{\sigma}$ имеет определенные значения в состояниях частицы с определенными значениями j и l :

$$\hat{l}\hat{\sigma} = \begin{cases} l & \text{в состоянии с } j = l + 1/2, \\ -l - 1 & \text{в состоянии с } j = l - 1/2, \end{cases} \quad (1)$$

так что рассматриваемое спин-орбитальное взаимодействие не зависит от r . Легко сообразить, что независимо от конкретного вида центрального потенциала $U(r)$ энергетические уровни $E_{n_r, l}$ в таком поле под действием рассматриваемого спин-орбитального взаимодействия расщепляются на два подуровня, причем смещение каждого из подуровней определяется выражением

$$\Delta E_{lj} = \begin{cases} -\alpha l, & j = l + 1/2, \\ \alpha(l + 1), & j = l - 1/2. \end{cases} \quad (2)$$

Соответственно энергетические уровни рассматриваемой модели определяются выражением

$$E_{n_r, lj} = -U_0 + \hbar\omega(2n_r + l + 3/2) + \Delta E_{lj} \quad (3)$$

(во избежание недоразумений подчеркнем, что (3) представляет точное решение для рассматриваемой модели, а не результат теории возмущений, так что никаких ограничений на величины ΔE_{lj} не возникает).

Отметим два свойства обсуждаемого расщепления уровней: 1) полная ширина расщепления $\Delta E_l = |E_{l, j=l+1/2} - E_{l, j=l-1/2}| = (2l + 1)\alpha$ возрастает с ростом l ;

2) среднее значение смещения уровней с учетом их статистических весов, равных $(2j + 1)$, равно нулю, так как

$$\sum_{j=j \pm 1/2} (2j + 1) \Delta E_{ij} = 0.$$

На рис. 34 слева изображено расщепление уровня с $N = 2$ невозмущенного осциллятора, а справа представлена картина нижних одночастичных уровней для рассматриваемой модели.

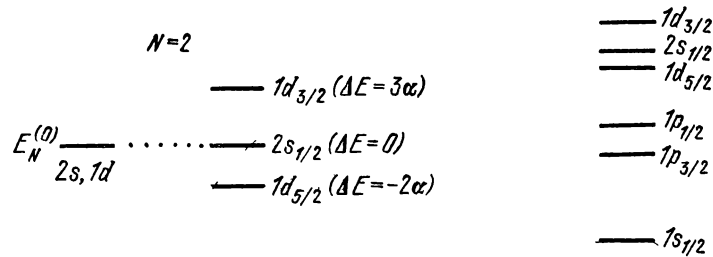


Рис. 34.

Учитывая, что в рассматриваемой модели основное состояние ядра определяется размещением нуклонов по нижним одночастичным уровням с учетом принципа Паули, полный момент J и четность P нуклонов заполненных оболочек равны $J^P = 0^+$, квантовые числа «дырочного» состояния такие же, как и у соответствующего одночастичного уровня (то же относится к двум и более дыркам), легко прийти к следующим предсказаниям в отношении полного момента и четности основных состояний указанных ядер:

1) у ядер ^{12}C , ^{14}C , ^{16}O , ^{40}Ca будет $J^P = 0^+$ (эти ядра имеют лишь заполненные оболочки);

2) ядра ^{13}N , ^{17}O , ^{27}Al , ^{13}C имеют сверх заполненных оболочек один нуклон (протон или нейтрон) или одну дырку, определяющие J^P для этих ядер: $(1/2)^-$, $(5/2)^+$, $(5/2)^+$, $(1/2)^-$ соответственно;

3) предсказания модели в отношении момента (но не четности) ядер ^6He , ^6Li , ^{10}B не однозначны. Так, для ядра ^6Li , имеющего сверх заполненной оболочки $(1s)^4$ протон и нейтрон в состоянии $1p_{3/2}$, согласно модели J^P может принимать одно из следующих значений: 3^+ , 2^+ , 1^+ , 0^+ . Совершенно аналогично предсказание для ядра ^{10}B , имеющего одну протонную и одну нейтронную дырки в оболочке $1p_{3/2}$: Ядро ^6He имеет два нейтрона в состоянии $1p_{3/2}$ (сверх заполненной оболочки $(1s)^4$) и согласно модели возможные значения J^P : 2^+ , 0^+ (значения 3^+ , 1^+ запрещены принципом Паули). Если, однако, иметь в виду явление *спаривания*, то для ядра ^6He предсказание J^P становится однозначным: $J^P = 0^+$.

12.22. С. ф. гамильтониана

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta - U_0 + \frac{1}{2} k r^2 - a r^2 \hat{\Gamma} \hat{\sigma}$$

могут быть выбраны также с. ф. коммутирующих с ним и друг с другом операторов \hat{j}^2 , \hat{l}^2 , \hat{j}_z . При этом однозначно определяется спин-угловая зависимость с. ф. $\Psi_E(\mathbf{r}) = f(r) \Psi_{jlj_z}(\mathbf{n})$ (по поводу в. ф. Ψ_{jlj_z} см. 5.41 и 5.42), а для радиальной части в. ф. у. Ш. дает

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M r^2} - U_0 + \frac{1}{2} (k - \gamma_{lj}) r^2 \right] f = E f, \quad (1)$$

где

$$\gamma_{lj} = \begin{cases} 2a l, & j = l + 1/2, \\ -2a(l+1), & j = l - 1/2 \end{cases}$$

(сравнить с формулой (1) предыдущей задачи).

Уравнение (1) совершенно аналогично радиальному у. Ш. для сферического осциллятора с упругостью $k_{lj} = k - \gamma_{lj}$ в состоянии с орбитальным моментом l . Так как уровни обычного сферического осциллятора определяются выражением

$$E_{n_r l} = E_N = \hbar \omega (2n_r + l + 3/2), \quad \omega = \sqrt{k/M},$$

то легко сообразить, что энергетический спектр согласно уравнению (1) имеет вид

$$E_{n_r l j} = -U_0 + \hbar \omega_{lj} (2n_r + l + 3/2), \quad \omega_{lj} = \sqrt{\frac{k_{lj}}{M}}$$

(естественно, рассматриваемая модель имеет смысл, пока $k_{lj} > 0$).

Читателю предлагается самостоятельно рассмотреть характер спин-орбитального расщепления уровней в случае $|\gamma_{lj}| \ll k$ и сравнить с результатом предыдущей задачи.

12.23. В рассматриваемых ядрах три нуклона находятся в оболочке $1s$. Такую конфигурацию можно рассматривать как одну дырку в оболочке $1s$, чем и определяются изотопический спин, момент и четность ядер: $T = 1/2$, $J^P = 1/2^+$ (при этом $T_3 = -1/2$ и $1/2$ для ${}^3\text{H}$ и ${}^3\text{He}$ соответственно).

Орбитальная (пространственная) часть в. ф. ядер симметрична по отношению к перестановке координат нуклонов (все они находятся в одном и том же $1s$ -состоянии). Соответственно спин-изоспиновая часть в. ф. должна быть антисимметричной. Ее явный вид определяется согласно общему правилу антисимметризации в. ф. состояния системы тождественных фермионов в случае, когда указано их распределение по (занятым) одночастичным состояниям. Для краткости записи будем использовать обозначения типа: $\rho_i(1)$ — в. ф. i -го нуклона в протонном зарядовом состоянии с определенным значением проекции спина $s_i = \pm 1/2$ и т. п.

Если три нуклона занимают состояния: $p_{\uparrow}, p_{\downarrow}, n_{\uparrow}$, то спин-изоспиновая часть в. ф. такого состояния системы (в целом) определяется детерминантом

$$\Psi_{T_3=-1/2, S_z=1/2} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} p_{\uparrow}(1) & p_{\downarrow}(1) & n_{\uparrow}(1) \\ p_{\uparrow}(2) & p_{\downarrow}(2) & n_{\uparrow}(2) \\ p_{\uparrow}(3) & p_{\downarrow}(3) & n_{\uparrow}(3) \end{vmatrix} \quad (1)$$

(очевидно, (1) описывает ядро ${}^3\text{He}$ в состоянии с $J_z = 1/2$, так как $J = S$).

Сделав в (1) замену $p \leftrightarrow n$, получим спин-изоспиновую часть в. ф. трехнуклонной системы — ядра ${}^3\text{H}$.

Аналогично, замена $\uparrow \leftrightarrow \downarrow$ дает в. ф. рассматриваемых состояний с противоположным ($J_z = -1/2$) значением проекции полного момента.

12.24. Так как момент и изоспин полностью заполненной нуклонами (обоих зарядовых состояний) оболочки равны нулю, то J и T ядра определяются нуклонами вне заполненных оболочек. Если оба нуклона находятся в одинаковых зарядовых состояниях (ядра ${}^{14}\text{C}$ и ${}^{14}\text{O}$), то изоспин ядра, очевидно, равен $T = 1$, а полный момент $J = 0$.

Если же один из нуклонов — протон, а другой — нейтрон, то возможны два значения изоспина: 0 и 1. При этом тождественность нуклонов (с учетом изотопической степени свободы) и связанный с нею обобщенный принцип Паули накладывают ограничения на значения момента J . Нетрудно сообразить, что при $T = 0$ возможно лишь значение $J = 1$, а при $T = 1$ — лишь $J = 0$ (см. также решение следующей задачи).

12.25. Имея в виду характер симметрии изоспиновой части в. ф. двух нуклонов: ее симметричность при $T = 1$ и антисимметричность при $T = 0$ относительно перестановки изоспиновых переменных нуклонов, а также характер симметрии в. ф. двух моментов одинаковой величины j^*) (в данной задаче $j_1 = j_2 = 3/2$) по отношению к перестановке их j_z -переменных в $j_{1z}j_{2z}$ -представлении (см. 3.39): симметричность в. ф. для $J = 2j, 2j - 2, \dots$ (в данном случае для $J = 3; 1$) и антисимметричность ее для $J = 2j - 1, 2j - 3, \dots$ (в данном случае для $J = 2; 0$) — и, наконец, учитывая одинаковую радиальную зависимость в. ф. обоих нуклонов, связанную с их эквивалентностью, заключаем:

1) для $T = 1$ возможны лишь значения $J = 2; 0$;

2) для $T = 0$ возможны лишь значения $J = 3; 1$.

12.26. В модели оболочек спин и магнитный момент ядра определяются лишь нуклонами вне заполненных оболочек. В случае одного такого нуклона оператор магнитного момента имеет вид

$$\hat{\mu} = g_l \hat{l} + g_s \hat{s}, \quad (1)$$

*) В данной задаче эта симметрия совпадает с симметрией спин-угловой части в. ф.

где g_l и g_s — орбитальный и спиновый гироманнитные множители, равные: $g_l = 1$, $g_s = 5,59$ для протона и $g_l = 0$, $g_s = -3,83$ для нейтрона (напомним, что μ и g измеряются в единицах ядерного магнетона, равного $e\hbar/2M_p c$).

Усредняя оператор (1) с использованием результата задачи 3.54 (сравнить с 12.2), легко находим магнитный момент и гироманнитный множитель для нуклона в состоянии с орбитальным моментом l и полным $j = l \pm 1/2$:

$$\begin{aligned} \mu_j &\equiv g_j j = \langle j, l, j_z = j | \hat{\mu}_z | j, l, j_z = j \rangle = \\ &= \frac{(g_l + g_s) j (j + 1) + (g_l - g_s) [l(l + 1) - 3/4]}{2(j + 1)}. \end{aligned} \quad (2)$$

Численные значения μ_j и g_l для ряда состояний приведены в таблице:

		$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$
Протон	μ	2,79	-0,26	3,79	0,12	4,79
	g	5,58	-0,53	2,53	0,08	1,92
Нейтрон	μ	-1,91	0,64	-1,91	1,15	-1,91
	g	-3,82	1,28	-1,27	0,77	-0,76

В случае одного нуклона (протона или нейтрона) в состоянии nl_j сверх заполненных оболочек спин ядра $J = j$, а его магнитный момент определяется формулой (2). Легко сообразить, что для ядра, имеющего в незаполненных оболочках одну дырку (протонную или нейтронную) в состоянии nl_j , также $J = j$ и магнитный момент определяется формулой (2), в которой для протонной (нейтронной) дырки под g_l и g_s следует понимать их значения для протона (нейтрона).

Имея в виду сказанное выше и руководствуясь схемой одночастичных уровней, полученной в 12.21, легко приходим к предсказаниям оболочечной модели для J и μ ядер, указанных в условии задачи:

	l	μ		l	μ
$^3\text{H} (p(1s_{1/2}))^*$	1/2	2,79	$^{15}\text{N} (p(1p_{1/2}))$	1/2	-0,26
$^3\text{He} (n(1s_{1/2}))$	1/2	-1,91	$^{17}\text{O} (n(1d_{5/2}))$	5/2	-1,91
$^{11}\text{B} (p(1p_{3/2})^{-1})$	3/2	3,79	$^{29}\text{Si} (n(2s_{1/2}))$	1/2	-1,91
$^{13}\text{C} (n(1p_{1/2}))$	1/2	0,64			

*) Здесь и ниже мы указываем нуклонную конфигурацию ядра лишь сверх заполненных оболочек; запись $(nl_j)^{-1}$ означает дырку в состоянии nl_j .

Согласие рассчитанного и экспериментального значений μ вполне удовлетворительное, за исключением ядер ^{11}B и ^{29}Si .

12.27. В модели оболочек магнитный момент и спин ядра определяются нуклонами вне заполненных оболочек. В рассматриваемой задаче

$$\hat{\mu} = g_p(l, j)\hat{j}_p + g_n(l, j)\hat{j}_n, \quad (1)$$

где $g_{p, n}(l, j)$ — гиромангнитные множители для протона и нейтрона в состоянии l_j ($j = j_p = j_n$) — были найдены в предыдущей задаче.

Усредняя оператор (1) с использованием результата задачи 3.54 (сравнить с решением задач 12.2 и 12.26), легко находим магнитный момент ядра с рассматриваемой нуклонной конфигурацией $(p(nl_j)^1 n(nl_j)^1)$ при спине ядра J ($\hat{J} = \hat{j}_p + \hat{j}_n$):

$$\mu(J) = \langle J, J_z = J | \hat{\mu}_z | J, J_z = J \rangle = \frac{g_p(l, j) + g_n(l, j)}{2} J. \quad (2)$$

Нетрудно сообразить, что формула (2) определяет также магнитный момент ядра, имеющего по одной протонной и нейтронной дырке в состоянии nl_j (сравнить с аналогичным утверждением предыдущей задачи).

Используя значения $g_{p, n}(l, j)$, рассчитанные в предыдущей задаче, легко приходим к следующим предсказаниям модели оболочек для магнитных моментов ядер:

	μ	J
$^2\text{H} (p(1s_{1/2})^1, n(1s_{1/2})^1)$	0,88	1
$^6\text{Li} (p(1p_{3/2})^1) n(1p_{3/2})^1)$	0,63	1
$^{10}\text{B} (p(1p_{3/2})^{-1}) n(1p_{3/2})^{-1})$	1,89	3
$^{14}\text{N} (p(1p_{1/2})^1) n(1p_{1/2})^1)$	0,38	1

В отношении значения μ для ^6Li см. также следующую задачу.

12.28. В условиях задачи оператор магнитного момента ядра можно представить в виде

$$\hat{\mu} = g_L \hat{L} + g_S \hat{S}, \quad (1)$$

где g_L, g_S — орбитальный и спиновый гиромангнитные множители для нуклонов (протона и нейтрона) незаполненной оболочки.

Усредняя оператор (1) с использованием результата задачи 3.54 (так же как и в предыдущих двух задачах), находим

магнитный момент ядра в состоянии с полным моментом (спином) J

$$\mu(L, S, J) \equiv \langle J, J_z = J | \hat{\mu}_z | J, J_z = J \rangle = \frac{(g_L + g_S)J(J+1) + (g_L - g_S)[L(L+1) - S(S+1)]}{2(J+1)} \quad (2)$$

где L, S — полные орбитальный и спиновый моменты нуклонов в ядре, которые в схеме LS -связи, наряду с J , характеризуют состояние ядра.

Найдем g_L . Для этого заметим, что оператор орбитального магнитного момента системы из протона и нейтрона равен

$$\hat{\mu}_{орб} = g_{L,p} \hat{L}_p + g_{L,n} \hat{L}_n \quad (3)$$

($g_{L,p(n)}$ — орбитальные гиромагнитные множители для протона и нейтрона, равные $g_p = 1$ и $g_n = 0$) и он принимает вид $\hat{\mu}_{орб} = g_L \hat{L}$ лишь после усреднения по состоянию системы «протон + нейтрон», отвечающему определенному значению L . При этом величина g_L также определяется с помощью результата задачи 3.54:

$$\mu_L \equiv g_L L = \frac{g_{L,p} + g_{L,n}}{2} L, \text{ т. е. } g_L = \frac{g_{L,p} + g_{L,n}}{2} = \frac{1}{2} \quad (4)$$

(при нахождении (4) учтено, что $l_p = l_n$)

Совершенно аналогично определяется значение

$$\mu_S \equiv g_S S = \frac{g_{S,p} + g_{S,n}}{2} S,$$

т. е.

$$g_S = \frac{g_{S,p} + g_{S,n}}{2} = 0,88. \quad (5)$$

Согласно (2), (4), (5) находим искомое значение

$$\mu(L, S, J) = 0,69J - \frac{0,19}{J+1} [L(L+1) - S(S+1)]. \quad (6)$$

В применении к ядру ${}^6\text{Li}$ с $J = 1$ формула (6) дает при различных значениях L, S (совместимых с $J = 1$)

$$\begin{aligned} \mu(0, 1, 1) &= 0,88 \quad (T=0); & \mu(2, 1, 1) &= 0,31 \quad (T=0); \\ \mu(1, 0, 1) &= 0,50 \quad (T=0); & \mu(1, 1, 1) &= 0,69 \quad (T=1). \end{aligned} \quad (7)$$

В (7) указаны также значения изоспина T для соответствующих состояний ядра (сравнить с решением 12.25).

Отметим, что совокупность экспериментальных данных о свойствах ядра ${}^6\text{Li}$ указывает на «предпочтительный» характер LS -связи в этом ядре, причем $L = 0, S = 1$.

12.29. Оператор магнитного момента нуклона (независимо от его зарядового состояния), находящегося в состоянии с квантовыми числами l и j , может быть записан в виде

$$\hat{\mu}_N = g_p(l, j) \left(\frac{1}{2} + \hat{\tau}_3 \right) \hat{\mathbf{j}} + g_n(l, j) \left(\frac{1}{2} - \hat{\tau}_3 \right) \hat{\mathbf{j}}, \quad (1)$$

где g_p и g_n — гиромагнитные множители для протона и нейтрона в состоянии nl_j , которые были найдены в 12.26.

Соответственно оператор магнитного момента ядра имеет вид

$$\hat{\mu} = \frac{g_p + g_n}{2} \sum_a \hat{\mathbf{j}}_a + (g_p - g_n) \sum_a \hat{\tau}_{3,a} \hat{\mathbf{j}}_a, \quad (2)$$

где сумма берется по всем нуклонам в (незаполненной) оболочке nl_j . В результате усреднения оператора (2) по изоспиновой части в. ф. рассматриваемого ядра, имеющего, очевидно, $T_3 = 0$, вторая сумма в (2) обратится в нуль. Действительно,

$$\langle T, T_3 = 0 | \hat{\tau}_{3,a} | T, T_3 = 0 \rangle \propto \langle T, T_3 = 0 | \hat{T}_3 | T, T_3 = 0 \rangle = 0$$

(мы учли формальную аналогию свойств момента и изоспина, равенство $[\hat{T}_i, \hat{\tau}_{k,a}] = i\epsilon_{ikl} \hat{\tau}_{l,a}$ и воспользовались результатом задачи 3.52). Соответственно магнитный момент ядра определяется первой суммой в (2), и так как $\sum_a \hat{\mathbf{j}}_a = \hat{\mathbf{J}}$, то он, очевидно,

равен

$$\mu(J) = 1/2 [g_p(l, j) + g_n(l, j)] J. \quad (3)$$

Это — естественное обобщение результата задачи 12.27.

Ядро ${}^{22}_{11}\text{Na}$ в основном состоянии имеет нуклонную конфигурацию $p(1d_{5/2})^3 n(1d_{5/2})^3$ (сверх заполненных оболочек; см. схему одночастичных уровней в решении задачи 12.21). Используя значения $g_{p,n}(l, j)$ для состояния $d_{5/2}$ (см. 12.26), находим согласно (3) предсказание модели оболочек для магнитного момента ядра ${}^{22}\text{Na}$, имеющего $J = 3$:

$$\mu_{\text{обол}} = 1,74,$$

практически совпадающее с экспериментальным значением $\mu_{\text{экс}} = 1,75$.

12.30. Оператор магнитного момента нуклона (независимо от его зарядового состояния) имеет вид

$$\hat{\mu}_N = (g_{l,p} \hat{\mathbf{l}} + g_{s,p} \hat{\mathbf{s}}) (1/2 + \hat{\tau}_3) + (g_{l,n} \hat{\mathbf{l}} + g_{s,n} \hat{\mathbf{s}}) (1/2 - \hat{\tau}_3), \quad (1)$$

где g_l и g_s — орбитальный и спиновый гиромагнитные множители, равные: $g_{l,p} = 1$, $g_{l,n} = 0$, $g_{s,p} = 5,59$, $g_{s,n} = -3,83$.

Соответственно оператор магнитного момента ядра равен

$$\hat{\mu} = g_L \hat{\mathbf{L}} + g_S \hat{\mathbf{S}} + \sum_a [(g_{l,p} - g_{l,n}) \hat{\mathbf{l}}_a + (g_{s,p} - g_{s,n}) \hat{\mathbf{s}}_a] \hat{\tau}_{3,a}, \quad (2)$$

где сумма берется по всем нуклонам в незаполненной оболочке,

$$\hat{L} = \sum_a \hat{l}_a, \quad \hat{S} = \sum_a \hat{s}_a, \quad g_L = \frac{g_{l,p} + g_{l,n}}{2} = \frac{1}{2}, \quad g_S = \frac{g_{s,p} + g_{s,n}}{2} = 0,88$$

(сравнить с формулой (2) предыдущей задачи, определяющей $\hat{\mu}$ в схеме jj -связи).

При усреднении (2) по состоянию ядра, отвечающему $T_3 = 0$, последнее слагаемое — сумма — в этом выражении (представляющее изовекторную часть $\hat{\mu}$) обращается в нуль (сравнить с предыдущей задачей). Соответственно магнитный момент ядер с $T_3 = 0$ определяется изоскалярной частью оператора $\hat{\mu}$:

$$\hat{\mu}_{\text{изоск}} = g_L \hat{L} + g_S \hat{S},$$

и равен (сравнить, например, с решением задачи 12.26)

$$\mu(L, S, J) = \frac{(g_L + g_S)J(J+1) + (g_L - g_S)(L(L+1) - S(S+1))}{2(J+1)},$$

где L, S — полные орбитальный и спиновый моменты нуклонов в ядре, которые в схеме LS -связи, наряду с J , характеризуют состояние ядра.

12.31. Оператор магнитного момента ядра, в котором все нуклоны (обоих зарядовых состояний) сверх заполненных оболочек находятся в одинаковых состояниях nl_j , имеет вид (см. 12.29)

$$\hat{\mu} = \frac{g_p(l, j) + g_n(l, j)}{2} \hat{J} + [g_p(l, j) - g_n(l, j)] \sum_a \hat{\tau}_3, a \hat{j}_a. \quad (1)$$

Магнитный момент ядра определяется как среднее значение по состоянию ядра:

$$\mu = \langle T, T_3, J, J_z = J | \hat{\mu}_z | T, T_3, J, J_z = J \rangle$$

(мы указываем лишь квантовые числа изоспина и полного момента), и в соответствии с (1) имеет вид

$$\mu = \mu_{\text{изоск}} + \mu_{\text{изовект}}, \quad (2)$$

где

$$\mu_{\text{изоск}} = \frac{g_p + g_n}{2} J, \quad \mu_{\text{изовект}} = (g_p - g_n) \left\langle \left| \sum_a \hat{\tau}_3, a \hat{j}_z, a \right| \right\rangle. \quad (3)$$

При применении (2), (3) к зеркальным ядрам (обозначим их A и \bar{A}) следует иметь в виду, что рассматриваемые состояния ядер являются двумя состояниями одной и той же системы нуклонов, различающимися лишь знаком проекции T_3 изоспина. Соответственно для таких ядер изоскалярная часть

магнитного момента $\mu_{\text{изосек}}$ одинакова, изовекторная $\mu_{\text{изовект}}$ отличается знаком, так что

$$\mu(A) + \mu(\bar{A}) = [g_p(l, i) + g_n(l, i)]J. \quad (4)$$

Для ядер ${}^3\text{H}$ и ${}^3\text{He}$ нуклонная конфигурация имеет вид $(1s)^2$ и, учитывая значения g_p для состояния $s_{1/2}$ (см. 12.26), согласно (4) получаем предсказание оболочечной модели для магнитных моментов этих ядер ($J = 1/2$)

$$\mu_{\text{обол.}}({}^3\text{H}) + \mu_{\text{обол.}}({}^3\text{He}) = 0,88,$$

которое следует сравнить с экспериментальным значением 0,78.

12.32. Квадрупольный момент определяется протоном сверх заполненных оболочек (протоны заполненных оболочек дают сферически симметричное распределение заряда, для которого $Q_0 = 0$) и равен

$$Q_0 = \int \Psi_{njlj_z=j}^* (3 \cos^2 \theta - 1) \Psi_{njlj_z=j} r^2 dV \quad (1)$$

(сравнить с решением задачи 12.4), где Ψ_{njlj_z} — в. ф. одночастичного состояния nlj , при этом j, j_z определяют момент (спин) ядра ($J = j, J_z = j_z$).

Для рассматриваемых состояний $j = l + 1/2$ и в. ф. в (1), очевидно, имеет вид

$$\Psi_{njlj_z=j} = Y_{ll}(\mathbf{n}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} f(r).$$

Так как

$$|Y_{ll}|^2 = \frac{(2l+1)!}{2^{l+2} l! \pi} \sin^{2l} \theta,$$

то выражение (1) принимает вид

$$Q_0 = \frac{(2l+1)!}{2^{l+2} l! \pi} \int (3 \cos^2 \theta - 1) \sin^{2l} \theta d\Omega \bar{r}_p^2, \quad (2)$$

где $\bar{r}_p^2 = \int_0^\infty |f(r)|^2 r^4 dr \equiv \int r^2 |\Psi_{njlj_z}|^2 dV$ — средний квадрат расстояния для протона сверх заполненных оболочек.

Элементарное интегрирование в (2) по углам ($d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$) дает:

а) $Q_0(s_{1/2}) = 0$; б) $Q_0(p_{3/2}) = -2/5 \bar{r}_p^2$; в) $Q_0(d_{5/2}) = -4/7 \bar{r}_p^2$ (обратить внимание на знак Q_0 ; см. также две следующие задачи).

Нетрудно сообразить, что квадрупольные моменты ядер, имеющих соответственно один протон сверх заполненных оболочек и одну протонную дырку (в том же состоянии), различаются знаком, в противоположность магнитным моментам таких ядер.

12.33. Квадрупольный момент определяется формулой (2) предыдущей задачи. Используя приведенный там же вид функции $|Y_{ll}|^2$, легко находим

$$Q_0 = \int \left\{ 2|Y_{ll}|^2 - \frac{6(l+1)}{2l+3}|Y_{l+1, l+1}|^2 \right\} d\Omega \bar{r}_p^2 = \\ = \left[2 - \frac{6(l+1)}{2l+3} \right] \bar{r}_p^2 = -\frac{2l-1}{2l+2} \bar{r}_p^2$$

(сравнить с результатом следующей задачи).

12.34. Задача решается аналогично 12.32, только теперь следует использовать в. ф. состояния с $j=l-1/2$, явный вид которых был получен в 5.42. Решить задачу таким способом читателю предлагается самостоятельно. Мы же приведем соображение, позволяющее получить ответ без вычислений, основываясь лишь на результате предыдущей задачи. Для этого вспомним полезный результат задачи 5.43:

$$\Psi_{j l_1 l_z}^*(\mathbf{n}) \Psi_{j l_1 l_z}(\mathbf{n}) = \Psi_{j l_2 l_z}^*(\mathbf{n}) \Psi_{j l_2 l_z}(\mathbf{n}),$$

выражающий одинаковую угловую зависимость от направления радиуса-вектора $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ частицы со спином $s = 1/2$ в ее состояниях с заданными j и j_z и различными значениями $l_{1,2} = j \pm 1/2$. Соответственно угловая часть в интеграле (1) задачи 12.32 зависит лишь от j (но не от $l = j \pm 1/2$), так что выражение для Q_0 , полученное в предыдущей задаче, $Q_0 = -\frac{2j-1}{2j+2} \bar{r}_p^2$ остается справедливым и в случае $j = l - 1/2$.

В связи с этим еще раз подчеркнем, что для рассматриваемых состояний ядер, содержащих лишь один протон сверх заполненных оболочек, $Q_0 < 0$, а для ядер, имеющих лишь одну протонную дырку, $Q_0 > 0$.

12.35. В приближении, в котором был определен квадрупольный момент Q_0 ядер в предыдущих задачах, когда считалось, что центр масс ядра (относительно которого и определяется Q_0) совпадает с центром масс системы нуклонов замкнутых оболочек, квадрупольный момент ядра в условиях данной задачи равен нулю.

Руководствуясь указанием к условию задачи, замечаем, что центр сферического распределения заряда нуклонов заполненных оболочек (их заряд Z , масса $(A-1)M$), совпадающий с их центром масс, находится в точке $\mathbf{r}_{об} = -\mathbf{r}_n/(A-1)$, где \mathbf{r}_n — радиус-вектор нейтрона относительно центра масс ядра как центра. При этом квадрупольный момент ядра связан с зарядом нуклонов заполненных оболочек и, как нетрудно сообразить, определяется выражением

$$Q_0^{(n)} = \frac{Z}{(A-1)^2} \int \Psi_{n j l_1 l_z}^* (3 \cos^2 \theta - 1) \Psi_{n j l_2 l_z} r^2 dV$$

(сравнить с решением задач 12.4 и 12.32), где Ψ_{njlj_z} — в. ф. одночастичного нейтронного состояния.

Имея в виду результаты задач 12.33 и 12.34, заключаем, что в рассматриваемом приближении квадрупольный момент ядра с одним нейтроном сверх заполненных оболочек равен

$$Q_0^{(n)} = -\frac{2j-1}{2j+2} \frac{Z}{(A-1)^2} r_n^2$$

(при этом спин ядра $J = j$).

12.36. Основному состоянию ядра соответствует распределение нуклонов по нижним одночастичным уровням с учетом принципа Паули.

Пренебрегая кулоновским взаимодействием, замечаем, что одночастичные уровни для протона и нейтрона одинаковы. При этом для ядра с $A = 2Z$ в основном состоянии будут заняты одни и те же одночастичные состояния как для протонов, так и для нейтронов.

Обозначив через ε_0 максимальную энергию занятых состояний (см. рис. 35; постоянная величина $-U_0$ опущена), замечаем, что объем фазового пространства, соответствующий занятым состояниям в объеме dV , равен

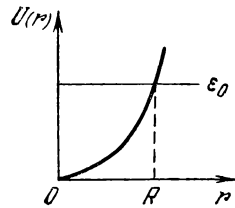


Рис. 35.

$$\begin{aligned} d\Gamma &= \frac{4\pi p_F^3}{3} dV = \\ &= \frac{4\pi}{3} \left[2m \left(\varepsilon_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \right]^{3/2} dV. \end{aligned} \quad (1)$$

Разделив (1) на $(2\pi\hbar)^3$, получим число различных орбитальных состояний, и так как в каждом таком состоянии находится по два протона и два нейтрона, то общее число нуклонов в объеме dV в основном состоянии ядра равно ($\omega = \sqrt{k/m}$)

$$dN = \frac{2}{3\pi^2\hbar^3} (m\omega R)^3 \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right)^{3/2} dV, \quad r \leq R \equiv \sqrt{\frac{2\varepsilon_0}{k}}. \quad (2)$$

Соответственно плотность нуклонов в ядре

$$n(r) = \frac{2}{3\pi^2\hbar^3} (m\omega R)^3 \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right)^{3/2}, \quad r \leq R \quad (3)$$

(при $r > R$, очевидно, $n(r) \equiv 0$).

Условие нормировки выражений (2), (3) на полное число нуклонов A приводит к следующему соотношению между параметрами модели ω , R :

$$\frac{m\omega R^2}{\hbar} = (12A)^{1/3}, \quad (4)$$

и позволяет записать (3) в виде

$$n(r) = \frac{8A}{\pi^2 R^3} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{3/2} \quad (5)$$

(нормировочный интеграл вычисляется элементарно с помощью подстановки $r/R = \sin u$).

Мы не будем проводить дальнейшее исследование рассматриваемой модели, так как выражение (5) резко противоречит экспериментальным данным, согласно которым плотность нуклонов в ядре почти постоянна, за исключением узкой области вблизи его границы.

12.37. Задача решается аналогично предыдущей. Только теперь граничный импульс p_F внутри ядра постоянен: $p_F = \sqrt{2m\epsilon_0}$. Соответственно формула (3) предыдущей задачи принимает вид

$$n(r) = \frac{2}{3\pi^2 \hbar^3} p_F^3 = \text{const}, \quad r < R. \quad (1)$$

Нормировка (1) на полное число нуклонов A дает $p_F^3 R^3 = \frac{9\pi}{8} A \hbar^3$, или, учитывая выражение для R , $p_F = \left(\frac{9\pi}{8}\right)^{1/3} \frac{\hbar}{r_0}$.

Соответствующая такому импульсу максимальная скорость нуклонов в ядре (рассматриваемом в условиях задачи фактически как идеальный ферми-газ) составляет

$$v_0 = \frac{p_F}{m} = \left(\frac{9\pi}{8}\right)^{1/3} \frac{m_e a_0}{m} \frac{\hbar}{m_e a_0} \approx \frac{c}{4}$$

($m/m_e \approx 1840$, $a_0 \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ см — боровский радиус, $v_{ат} \equiv \hbar/m_e a_0 \approx c/137$, c — скорость света), а кинетическая энергия

$$\epsilon_0 \approx m v_0^2 / 2 = \frac{1}{2} (v_0/c)^2 m c^2 \approx 30 \text{ МэВ} \ll m c^2 \approx 940 \text{ МэВ}.$$

Г л а в а 13

ТЕОРИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ

13.1. Отыскание решения у. Ш. ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$)

$$[\Delta + k^2] \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)} = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)},$$

имеющего приведенную в условии задачи асимптотику при $r \rightarrow \infty$, эквивалентно решению интегрального уравнения

$$\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi \hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}') dV'. \quad (1)$$

Переход от дифференциальной формы у. Ш. к интегральной осуществляется стандартным образом с помощью функции

Грина $G_E^{(+)}$ у Ш для свободных частиц, имеющей вид

$$G_E^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

$$(\Delta + k^2) G_E^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

(сравнить с одномерным случаем, рассмотренным в 2.57)
 При $r \rightarrow \infty$ имеем

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \approx \frac{1}{r} e^{ikr} e^{-ikr'}, \quad \mathbf{k} \equiv k \frac{\mathbf{r}}{r},$$

и соотношение (1) принимает вид

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \approx e^{ikr} + \frac{1}{r} e^{ikr} \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) \int e^{-ikr'} U(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}') dV' \quad (2)$$

из которого и вытекает приведенное в условии задачи представление амплитуды рассеяния, удобное для различных приближенных расчетов. Так, при $\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)} \approx e^{ik_0 r}$ из (2) получаем амплитуду рассеяния в первом борновском приближении.

13.2. На первый взгляд может показаться, что условие убывания потенциала (т. е. $n > 0$) является необходимым и достаточным условием того, чтобы в. ф. не искажалась на больших расстояниях. На самом деле ситуация более тонкая. Асимптотика в. ф. при $r \rightarrow \infty$ вида

$$\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}) \approx e^{ik_0 r} + f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k} \equiv k \frac{\mathbf{r}}{r}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1)$$

предполагает, что амплитуда рассеяния является ограниченной функцией (за исключением отдельных значений энергии и углов рассеяния). Согласно предыдущей задаче

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ikr} U(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}) dV, \quad (2)$$

и условие сходимости интеграла в этом выражении на больших расстояниях, где в. ф. имеет вид (1), а поле $U \propto r^{-n}$, будет выполнено, если сходится интеграл ($\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$)

$$\int_{r>R} \frac{1}{r^n} e^{-iqr} dV = \frac{4\pi}{q} \int_R^\infty r^{-n+1} \sin qr dr. \quad (3)$$

Для сходимости интеграла (3) требуется, чтобы было $n > 1$, что и представляет искомое ограничение на быстроту убывания потенциала.

13.3. В. ф. $\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}$, описывающая процесс рассеяния частиц с импульсом $\hbar\mathbf{k}_0$, удовлетворяет уравнению (см., например, 13.1)

$$\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)} = e^{ik_0 r} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}') dV'. \quad (1)$$

Учитывая разложение

$$k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = kr - k\frac{r r'}{r} + \frac{k}{2}\left[\frac{r'^2}{r} - \frac{(r r')^2}{r^3}\right] + \quad (r' \ll r), \quad (2)$$

замечаем, что при выполнении условий $r \gg R$ и $r \gg kR^2$ в интеграле (1), в котором существенную роль играют значения $r' \leq R$, можно заменить $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$ на r^{-1} , а в показателе экспоненты ограничиться первыми двумя членами разложения (2). При этом выражение (1) принимает вид

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} = e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-ikr'} U(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}') dV',$$

т. е. определяет асимптотику в. ф. при $r \rightarrow \infty$.

Подчеркнем, что в случае быстрых частиц ($kR \gg 1$) в. ф. имеет асимптотический вид лишь на расстоянии $r \gg kR^2 \gg R$ (а не просто при $r \gg R$, как может показаться на первый взгляд).

13.4. В борновском приближении расчет амплитуды рассеяния сводится к вычислению интеграла

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV = \frac{im}{\hbar^2 q} \int_0^\infty U(r) [e^{iqr} - e^{-iqr}] r dr. \quad (1)$$

Так как $d\sigma = |f|^2 d\Omega$, то полное сечение рассеяния в борновском приближении равно

$$\sigma(E) = \int |f|^2 d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f|^2 \sin\theta d\theta = \frac{\pi\hbar^2}{2mE} \int_0^\pi f^2(q) dq^2 \quad (2)$$

(напомним $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, $q = 2k \sin(\theta/2)$).

Вычисление интегралов (1), (2) дает:

$$a) f = -\frac{2m\alpha R^2}{\hbar^2} \frac{\sin qR}{qR}, \quad \sigma(E) = \frac{4\pi m\alpha^2 R^2}{\hbar^2 E} \int_0^{\sqrt{8mER^2/\hbar^2}} \frac{\sin^2 x}{x} dx.$$

Интеграл, определяющий $\sigma(E)$, не выражается через элементарные функции (его можно выразить через интегральный синус).

Предельные случаи малых ($kR \ll 1$) и больших ($kR \gg 1$) энергий:

$$\sigma(E) \underset{E \rightarrow 0}{\approx} \frac{16\pi m^2 \alpha^2 R^4}{\hbar^4}, \quad \sigma(E) \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\pi m \alpha^2 R^2}{\hbar^2 E} \ln \frac{8mER^2}{\hbar^2}$$

(при $E \rightarrow \infty$ интеграл в выражении для $\sigma(E)$ расходится; для его вычисления следует заменить осциллирующий множитель $\sin^2 x$ средним значением, равным $1/2$)

Условием применимости полученных выражений является выполнение хотя бы одного из двух неравенств: $mR|\alpha| \ll \hbar^2$ или $|\alpha| \ll \hbar v$.

$$б) f = -\frac{4mU_0R^3}{\hbar^2(1+q^2R^2)^2}, \quad \sigma(E) = \frac{8\pi mR^4U_0^2}{3\hbar^2E} \left[1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{8mER^2}{\hbar^2}\right)^3} \right],$$

$$\sigma(E) \underset{E \rightarrow 0}{\approx} \frac{64\pi m^2R^6U_0^2}{\hbar^4}, \quad \sigma(E) \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{8\pi mR^4U_0^2}{3\hbar^2E}.$$

Условия применимости: $mR^2|U_0| \ll \hbar^2$ или $R|U_0| \ll \hbar v$.

$$в) f = -\frac{2m\alpha R^2}{\hbar^2(1+q^2R^2)}, \quad \sigma(E) = 16\pi \left(\frac{m\alpha R^2}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{1 + \frac{8mER^2}{\hbar^2}},$$

$$\sigma(E) \underset{E \rightarrow 0}{\approx} 16\pi \left(\frac{m\alpha R^2}{\hbar^2}\right)^2, \quad \sigma(E) \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{2\pi m\alpha^2 R^2}{\hbar^2 E}.$$

Условия применимости: $mR|\alpha| \ll \hbar^2$ или $|\alpha| \ll \hbar v$.

$$г) f = -\frac{\pi m\alpha}{\hbar^2 q}; \quad \text{условие применимости: } m|\alpha| \ll \hbar^2.$$

Полное сечение рассеяния равно бесконечности из-за медленного убывания потенциала на больших расстояниях $r \rightarrow \infty$.

$$д) f = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \left[\frac{R \cos(qR)}{q^2} - \frac{\sin(qR)}{q^3} \right],$$

$$\sigma\left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{mU_0R^2}{\hbar^2}\right)^2 \left[1 - \frac{1}{(2kR)^2} + \frac{\sin(4kR)}{(2kR)^3} - \frac{\sin^2(2kR)}{(2kR)^4} \right],$$

$$\sigma(E) \underset{E \rightarrow 0}{\approx} \frac{16\pi m^2 U_0^2 R^6}{9\hbar^4}, \quad \sigma(E) \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\pi m U_0^2 R^4}{\hbar^2 E}.$$

Условия применимости: $mR^2|U_0| \ll \hbar^2$ или $R|U_0| \ll \hbar v$.

$$е) f = -\frac{\sqrt{\pi} m U_0 R^3}{2\hbar^2} e^{-q^2 R^2/4},$$

$$\sigma(E) = \frac{\pi^2 m U_0^2 R^4}{4\hbar^2 E} \left[1 - \exp\left(-\frac{4mER^2}{\hbar^2}\right) \right],$$

$$\sigma(E) \underset{E \rightarrow 0}{\approx} \frac{\pi^2 m^2 U_0^2 R^6}{\hbar^4}, \quad \sigma(E) \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\pi^2 m U_0^2 R^4}{4\hbar^2 E}.$$

Условия применимости: $mR^2|U_0| \ll \hbar^2$ или $R|U_0| \ll \hbar v$.

Так как в рассматриваемом случае борновская амплитуда убывает при больших q^2 экспоненциально, то при достаточно больших значениях q^2 борновское приближение неприменимо. Соответственно в выражении для полного сечения рассеяния учет экспоненциально малого слагаемого является превышением точности (см. [3] и 13.15).

13.5. Как известно, решение задачи об упругом рассеянии в поле $U(r)$ по теории возмущений приводит к следующему выражению для в. ф.: $\Psi_k^{(+)} \approx \Psi_k^{(0)} + \Psi_k^{(1)}$, где $\Psi_k^{(0)} = \exp(ikr)$ и

$$\Psi_k^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') e^{ikr'} dV'. \quad (1)$$

Для нахождения $\Psi_k^{(1)}(0)$ в случае центрального поля удобно в выражении (1) (при $r=0$) выполнить интегрирование по углам θ', φ' , используя сферические переменные с полярной осью вдоль вектора \mathbf{k} . Элементарное интегрирование дает

$$\Psi_k^{(1)}(0) = \frac{im}{k\hbar^2} \int_0^\infty U(r) (e^{2ikr} - 1) dr. \quad (2)$$

В случае полей $U = U_0 R\delta(r-R)$ и $U = U_0 e^{-r/R}$ согласно (2) находим:

$$a) \Psi_k^{(1)}(0) = \frac{imU_0R}{k\hbar^2} (e^{2ikR} - 1);$$

$$б) \Psi_k^{(1)}(0) = -\frac{2mR^2U_0}{\hbar^2(1-2ikR)}.$$

Как и следовало ожидать, в условиях применимости борновского приближения (когда выполнено хотя бы одно из двух неравенств $mR^2|U_0| \ll \hbar^2$ или $mR|U_0| \ll k\hbar^2$) $|\Psi_k^{(1)}(0)| \ll 1$, т. е. $|\Psi_k^{(1)}(0)| \ll |\Psi_k^{(0)}| = 1$.

13.6. Указанное свойство $\sigma(E)$ становится очевидным, если учесть, что в борновском приближении амплитуда рассеяния равна

$$f(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-iqr} U(r) dV = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \sin qr U(r) r dr,$$

и при вычислении сечения рассеяния $\sigma(E) = \int |f(q)|^2 d\Omega$ перейти от угловых переменных θ, φ к переменным $q^2 = 2k^2(1 - \cos\theta)$, φ ; при этом

$$E\sigma(E) = \frac{\pi\hbar^2}{2m} \int_0^{8mE/\hbar^2} |f(q)|^2 dq^2.$$

13.7. В борновском приближении

$$\sigma(E) = \int |f(\mathbf{q})|^2 d\Omega, \quad f(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-iqr} U(\mathbf{r}) dV. \quad (1)$$

Так как $q^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) = 4mE(1 - \cos\theta)/\hbar^2$, то при $E=0$

$$\sigma(E=0) = \int |f(0)|^2 d\Omega = 4\pi |f(0)|^2. \quad (2)$$

Учитывая неравенство

$$|\tilde{U}(\mathbf{q})| \equiv \left| \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV \right| \leq \int |U(\mathbf{r})| dV = \left| \int U(\mathbf{r}) dV \right| = |\tilde{U}(0)| \quad (3)$$

(в (3) существенно, что вещественная функция $U(\mathbf{r})$ является знакопостоянной) и замечая, что при $E \neq 0$ для рассеяния под углом $\theta \neq 0$ имеем $q^2 \neq 0$, находим, сравнивая (1) — (3), что $\sigma(E) \leq \sigma(0)$, причем знак равенства реализуется лишь при $E = 0$.

13.8. Заменяя в общей формуле для амплитуды рассеяния

$$f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{U} \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}) dV$$

(см., например, 13.1) точную в. ф. $\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r})$ на в. ф. $e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}$ свободной частицы и учтя вид оператора $\hat{U}_{\text{обм}}$, находим

$$f_{\text{обм}}^{\text{B}}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) \equiv f_{\text{обм}}^{\text{B}}(\Delta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\Delta\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV, \quad (1)$$

где $\Delta = \mathbf{k} + \mathbf{k}_0$, так что $\Delta^2 = 2k^2(1 + \cos\theta)$. Если выразить амплитуду рассеяния через энергию и угол рассеяния, то, очевидно,

$$f_{\text{обм}}^{\text{B}}(E, \theta) = f_0^{\text{B}}(E, \pi - \theta), \quad (2)$$

где $f_0^{\text{B}}(E, \theta)$ — амплитуда рассеяния в «обычном» центральном поле $U(r)$.

Как известно, при рассеянии быстрых частиц $kR \gg 1$ на «обычном» потенциале рассеяние происходит в основном вперед в область углов $\theta \sim (kR)^{-1} \ll 1$ (где R — радиус потенциала). В случае обменного потенциала согласно (2) рассеяние частиц происходит в основном назад, т. е. углы рассеяния близки к π .

В случае потенциала, представляющего суперпозицию «обычного» и «обменного», дифференциальное сечение рассеяния быстрых частиц будет иметь резкие максимумы в направлениях рассеяния вперед и назад ($\theta \approx 0$ и $\theta \approx \pi$).

13.9. В борновском приближении амплитуда рассеяния выражается через фурье-компоненту потенциала ($\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$)

$$f^{\text{B}}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{q}), \quad \tilde{U}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV \quad (1)$$

Фурье-компонента $\tilde{U}(\mathbf{q})$ функции $U(\mathbf{r})$, отличной от нуля в области $r \leq R$, существенно отлична от нуля лишь при $qR \leq 1$, так как при $qR \gg 1$ интеграл, определяющий $\tilde{U}(\mathbf{q})$, мал из-за быстрых осцилляций подинтегральной функции, связанных с наличием множителя $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$. Так как $q^2 = 2k^2(1 - \cos\theta)$, то из условий $kR \gg 1$ и $qR \leq 1$ следует хорошо известный факт, что рассеяние быстрых частиц происходит в основном под малыми углами $\theta \sim (kR)^{-1} \ll 1$.

Выясним, какие упрощения можно произвести в выражении (1) и формуле, определяющей полное сечение рассеяния $\sigma(E) = \int |f|^2 d\Omega$, при $kR \gg 1$, имея в виду, что существенную роль играют лишь малые углы рассеяния (для которых $q^2 \approx \approx k^2 \theta^2 \sim R^{-2}$). Разложим вектор \mathbf{q} на две составляющие: $\mathbf{q} = \mathbf{q}_\perp + \mathbf{q}_\parallel$, где вектор \mathbf{q}_\parallel направлен вдоль вектора \mathbf{k}_0 , а $\mathbf{q}_\perp \perp \mathbf{k}_0$ (рис. 36). При $\theta \ll 1$ имеем $q = k_0(1 - \cos \theta) \approx k_0 \theta^2/2$, $q_\perp \approx k_0 \theta$, т. е. $q_\perp \gg q$. Так как $q \approx q_\perp$, то $q\mathbf{r} \approx q_\perp \mathbf{r}$ и формула (1) принимает вид

$$\begin{aligned} \tilde{U}(\mathbf{q}) &\approx \tilde{U}(\mathbf{q}_\perp) = \\ &= \int \int e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} U(\boldsymbol{\rho}, z) dz d^2\rho. \end{aligned} \quad (2)$$

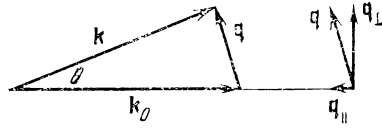


Рис. 36.

Далее, величину $k^2 d\Omega_{\mathbf{k}}$ можно рассматривать как элемент площади сферы радиуса k ($d\Omega_{\mathbf{k}}$ — элемент телесного угла, заключающий направления импульсов рассеянных частиц). Часть сферы вблизи полярной оси, направленной вдоль вектора \mathbf{k}_0 , можно рассматривать как плоскую поверхность, перпендикулярную вектору \mathbf{k}_0 , и поэтому $k^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = dS = dq_{\perp x} dq_{\perp y} = d^2q_\perp$ (ось z направлена вдоль вектора \mathbf{k}_0).

Таким образом,

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^2 k^2} \int |\tilde{U}(\mathbf{q}_\perp)|^2 d^2q_\perp. \quad (3)$$

Подставив в формулу (3) выражение (2), имеем

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{m}{8\pi^2 \hbar^2 E} \int \left[\int \int e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} U(\boldsymbol{\rho}, z) dz d^2\rho \right] \times \\ &\quad \times \left[\int \int e^{i\mathbf{q}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}'} U(\boldsymbol{\rho}', z') dz' d^2\rho' \right] d^2q_\perp. \end{aligned} \quad (4)$$

После интегрирования в выражении (4) по \mathbf{q}_\perp с помощью формулы

$$\int e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot (\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')} d^2q_\perp = (2\pi)^2 \delta(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')$$

легко выполняется интегрирование и по переменной $\boldsymbol{\rho}'$, и получается требуемое представление сечения рассеяния быстрых частиц:

$$\sigma_{E \rightarrow \infty} = \frac{m}{2\hbar^2 E} \int \left[\int U(\boldsymbol{\rho}, z) dz \right]^2 d^2\rho. \quad (5)$$

Для поля $U = U_0 e^{-r^2/R^2} \equiv U_0 e^{-\boldsymbol{\rho}^2/R^2} e^{-z^2/R^2}$ элементарное интегрирование в формуле (5) дает $\sigma(E) = \pi^2 m U_0^2 R^4 / 4E \hbar^2$.

13.10. Борновское приближение является первым, линейным членом разложения амплитуды рассеяния в ряд по «степеням взаимодействия» (более точно, параметром, по которому ведет

ся разложение, является либо $m|U_0|R^2/\hbar^2$, либо $|U_0|R/\hbar v$, где U_0 , R — характерная величина потенциала и его радиус, v — скорость частиц; малость по сравнению с единицей одного из этих параметров является условием применимости борновского приближения). Соответственно сечение рассеяния также разлагается в ряд по указанному малому параметру. Но так как $\sigma \sim |f|^2$, то разложение сечения начинается с членов второго порядка малости, и поэтому в оптической теореме $4\pi \operatorname{Im} f(E, \theta = 0)/k = \sigma(E)$ в левой части, как и в правой, не должно быть слагаемого, линейного по параметру разложения, откуда с необходимостью следует $\operatorname{Im} f^B(\theta = 0) = 0$. При этом приближенное выполнение оптической теоремы обеспечивается мнимой частью амплитуды рассеяния во втором порядке теории возмущений (см. следующую задачу).

13.11. Воспользуемся известными выражениями для амплитуды рассеяния в первом и втором порядках теории возмущений [3] (\mathbf{k}_0, \mathbf{k} — волновые векторы частицы до и после рассеяния):

$$f^B(\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{q}), \quad \tilde{U}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV,$$

$$f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = \frac{m^2}{8\pi^4\hbar^4} \int \frac{\tilde{U}(\mathbf{x} - \mathbf{k}_0) \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{x}) d^3\mathbf{x}}{x^2 - k_0^2 - i\varepsilon}$$

($\varepsilon > 0$ — бесконечно малая величина).

Для рассеяния вперед ($\theta = 0, \mathbf{k}_0 = \mathbf{k}$) имеем

$$f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0) = \frac{m^2}{8\pi^4\hbar^4} \int \frac{|\tilde{U}(\mathbf{x} - \mathbf{k}_0)|^2 d^3\mathbf{x}}{x^2 - k_0^2 - i\varepsilon} \quad (1)$$

(мы учли, что $\tilde{U}(\mathbf{q}) = \tilde{U}^*(-\mathbf{q})$). Из равенства (1) следует

$$\operatorname{Im} f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0) = \frac{m^2}{8\pi^4\hbar^4} \int \frac{\varepsilon}{(x^2 - k_0^2)^2 + \varepsilon^2} |\tilde{U}(\mathbf{x} - \mathbf{k}_0)|^2 d^3\mathbf{x}. \quad (2)$$

Замечая, что при бесконечно малом $\varepsilon > 0$ функция

$$g(x, \varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\pi(x^2 + \varepsilon^2)} \rightarrow \delta(x)$$

является δ -функцией (действительно, функция $g(x, \varepsilon)$ отлична от нуля лишь при $x \sim \varepsilon \rightarrow 0$, а интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} g(x, \varepsilon) dx = 1$,

как и требуется для δ -функции), и записав $d^3\mathbf{x} = \frac{x}{2} dx^2 d\Omega_n$, $\mathbf{x} = x\mathbf{n}$, выражение (2) легко преобразовать к виду

$$\operatorname{Im} f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0) = \frac{m^2}{16\pi^3\hbar^4} \int |\tilde{U}(x\mathbf{n} - \mathbf{k}_0)|^2 x \delta(x^2 - k_0^2) dx^2 d\Omega_n =$$

$$= \frac{m^2 k_0}{16\pi^3\hbar^4} \int |\tilde{U}(k_0\mathbf{n} - \mathbf{k}_0)|^2 d\Omega_n = \frac{k_0}{4\pi} \int |f^B(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}. \quad (3)$$

Полученное соотношение $\text{Im } f^{(2)}(E, \theta = 0) = k\sigma^{\text{B}}(E)/4\pi$ представляет оптическую теорему во втором порядке теории возмущений (в первом порядке она имеет вид тождества $0 \equiv 0$, см. 13.10).

13.12. Искомое представление $|\eta|$ следует из соотношений

$$\sigma(E) = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(E, \theta = 0),$$

$$(d\sigma/d\Omega)_{\theta=0} = [\text{Re } f(E, \theta = 0)]^2 + [\text{Im } f(E, \theta = 0)]^2,$$

так что

$$|\eta(E)| = 4\pi \sqrt{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=0} - \left(\frac{k\sigma(E)}{4\pi}\right)^2} / k\sigma(E), \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Так как $\text{Re } f(E, \theta = 0)$ отлична от нуля уже в первом порядке теории возмущений и при этом не зависит от энергии:

$$\text{Re } f(E, \theta = 0) \approx f^{\text{B}}(E, \theta = 0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) dV,$$

а $\text{Im } f(E, \theta = 0) > 0$ отлична от нуля лишь во втором порядке теории возмущений, то в условиях применимости борновского приближения $\eta(E)$ обладает следующими свойствами:

а) функция $\eta(E)$ имеет определенный знак (причем в поле отталкивания $U(r) \geq 0$ имеем $\eta(E) < 0$, а в поле притяжения $U(r) \leq 0$, наоборот, $\eta(E) > 0$);

б) $|\eta(E)| \gg 1$ при всех энергиях (если отвлечься от специального случая знакопеременного потенциала, когда интеграл $\int U(r) dV$ аномально мал по сравнению с $\int |U(r)| dV$).

Легко также заметить, что $|\eta(E)| \rightarrow \infty$ при $E \rightarrow 0$ в случае произвольного потенциала, независимо от того, можно ли его рассматривать как возмущение или нет.

13.13. Амплитуда рассеяния на двух центрах в борновском приближении равна

$$f_{2\text{ц}}^{\text{B}}(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} [U_0(\mathbf{r}) + U_0(\mathbf{r} - \mathbf{a})] dV = f_0^{\text{B}}(\mathbf{q})(1 + e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}}) \quad (1)$$

(во втором интеграле сделана замена переменной $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{a}$).

Так как $q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$, то при $ka \ll 1$ также $qa \ll 1$; при этом $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}} \approx 1$, $f_{2\text{ц}}^{\text{B}} \approx 2f_0^{\text{B}}$ и сечение рассеяния на двух центрах в четыре раза больше одноцентрового: $\sigma_{2\text{ц}} \approx 4\sigma_0$.

Учитывая соотношение (1), сечение рассеяния на двух центрах можно записать в виде

$$\sigma_{2\text{ц}} = 2 \int |f_0^{\text{B}}(\mathbf{q})|^2 (1 + \cos \mathbf{q}\mathbf{a}) d\Omega. \quad (2)$$

В случае $kR \gg 1$ и $a \gg R$ имеем $ka \gg 1$, и поэтому величина $\mathbf{q}\mathbf{a}$ заметно изменяется уже при небольшом изменении угла рассеяния. Соответственно слагаемое в интеграле (2), содержащее

$\cos \mathbf{q}\mathbf{a}$, является быстро осциллирующим и при интегрировании дает вклад, много меньший вклада первого, неосциллирующего слагаемого. Поэтому в рассматриваемых условиях $kR \gg 1$, $a \gg R$ сечение рассеяния на двух центрах в два раза больше одноцентрового: $\sigma_{2ц} \approx 2\sigma_0$.

Причина того, что соотношение между двухцентровым и одноцентровым сечениями рассеяния зависит от условий рассеяния, состоит в изменении характера интерференции волн, рассеянных на каждом из центров.

13.14. Амплитуда рассеяния равна (сравнить с предыдущей задачей)

$$f_N^B(\mathbf{q}) = f_0(q) \sum_n e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}_n} \equiv f_0(q) G_N(\mathbf{q}). \quad (1)$$

Соответственно, дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma_N}{d\Omega} = \frac{d\sigma_0}{d\Omega} |G_N(\mathbf{q})|^2. \quad (2)$$

Подчеркнем, что множитель $|G_N(\mathbf{q})|^2$ зависит только от расположения центров в пространстве и вектора \mathbf{q} (но не от характера взаимодействия частицы с отдельным центром!).

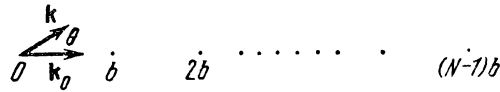


Рис. 37.

В случае линейной цепочки рассеивающих центров (рис. 37) $\mathbf{a}_n = (n-1)b\mathbf{n}_0$, $\mathbf{n}_0 = \mathbf{k}_0/k_0$, и так как $\mathbf{q}\mathbf{n}_0 = -q^2/2k$, то

$$G_N = \sum_{n=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}_n} = \frac{1 - \exp(iNq^2b/2k)}{1 - \exp(iq^2b/2k)},$$

$$|G_N(\mathbf{q})| = \left[\frac{\sin(Nq^2b/4k)}{\sin(q^2b/4k)} \right]^2. \quad (3)$$

При $N \gg 1$ согласно (3) $|G_N|^2$ существенно велико лишь при выделенных значениях величины q , таких, что $q^2b/4k \approx \pi\rho$, $\rho = 0, 1, \dots$, т. е. частицы рассеиваются в основном лишь под некоторыми определенными углами.

В случае $kb \ll 1$ (при этом также $ab \ll 1$) полное сечение рассеяния частиц можно записать в виде

$$\sigma = \frac{\pi N}{k^2} \int_0^{4k^2} |f_0^B(q)|^2 \left[\frac{\sin(Nq^2b/4k)}{Nq^2b/4k} \right]^2 N dq^2. \quad (4)$$

Так как функция $(\sin y/y)^2$ существенно отлична от нуля лишь при $y \leq 1$, то в интеграл (4) основной вклад вносит область $\leq k/\Lambda b$. Поэтому величину $|f_0^B(q)|^2$ можно вынести из-под знака интеграла в точке $q=0$ и, учитывая значение интеграла

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy = - \int_0^{\infty} \sin^2 y d\left(\frac{1}{y}\right) = \int_0^{\infty} \frac{2 \sin y \cos y}{y} dy = \\ = \int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2},$$

найти полное сечение рассеяния частиц в виде $\sigma = 2\pi^2 N |f_0^B(0)|^2 / bk$.

13.15. Учитывая, что фурье-компонента потенциала равна

$$\tilde{U}(q) = \int U_0 e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - r^2/R^2} dV = \pi \sqrt{\pi} R^3 U_0 e^{-q^2 R^2/4},$$

амплитуду рассеяния во втором порядке теории возмущений согласно общей формуле для $f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})$ можно представить в виде

$$f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = \frac{m^2}{8\pi^4 \hbar^4} \int \frac{\tilde{U}(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_0) \tilde{U}(\mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa})}{\boldsymbol{\kappa}^2 - k_0^2 - i\varepsilon} d^3\boldsymbol{\kappa} = \\ = \frac{m^2 R^6 U_0^2}{8\pi \hbar^4} e^{-q^2 R^2/8} \int \frac{\exp\left\{-\frac{R^2}{2} [\boldsymbol{\kappa} - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})/2]^2\right\}}{\boldsymbol{\kappa}^2 - k_0^2 - i\varepsilon} d^3\boldsymbol{\kappa}. \quad (1)$$

Из выражения (1) видно, что доминирующую роль в интеграле по $\boldsymbol{\kappa}$ играет область, в которой $|\boldsymbol{\kappa} - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})/2| R \leq 1$ (в остальных точках подынтегральная функция экспоненциально мала). В этой области значений $\boldsymbol{\kappa}$ при $qR \gg 1$ (при этом также $|\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}| R \gg 1$) знаменатель подынтегральной функции в выражении (1) изменяется очень незначительно, и его можно вынести за знак интегрирования в точке $\boldsymbol{\kappa} = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})/2$; получающийся при этом интеграл вычисляется элементарно заменой переменной $\boldsymbol{\kappa}' = \boldsymbol{\kappa} - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})/2$, и для $f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})$ в области больших передач импульса $qR \gg 1$ находим следующее выражение:

$$f^{(2)} = - \frac{\sqrt{2\pi} m^2 R^3 U_0^2}{q^2 \hbar^4} e^{-q^2 R^2/8}.$$

Так как в борновском приближении $f^B = f^{(1)} \propto e^{-q^2 R^2/4}$, то при достаточно больших значениях q^2 будет $|f^{(2)}| \gg |f^B|$ ($f^{(2)}$ убывает более медленно, чем f^B). Это означает, что при больших значениях q^2 борновское приближение неприменимо и при расчете амплитуды рассеяния по теории возмущений нельзя ограничиваться первыми членами ряда этой теории.

13.16. При энергии частиц $E = 0$ борновская и точная амплитуды рассеяния определяются выражениями

$$f^B(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) dV, \quad f^T(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) \Psi_0(r) dV, \quad (1)$$

где $\Psi_0(r)$ — в. ф. состояния с $E = 0$, удовлетворяющая уравнению

$$\Psi_0(r) = 1 - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r') \frac{1}{|r-r'|} \Psi_0(r') dV' \quad (2)$$

(см., например, 13.1; при $E = 0$ также $k_0 = 0$, при этом функции $\Psi_0^{(+)}$, $\Psi_0^{(-)}$ совпадают, и мы пишем просто Ψ_0).

В поле отталкивания $U(r) \geq 0$ в. ф. состояния с $E = 0$ является в. ф. основного состояния, она не имеет нулей, т. е. знакопостоянна, и так как $\Psi_0(\infty) = 1$, то $\Psi_0(r) \geq 0$. При этом интеграл в выражении (2) положителен; таким образом, в поле отталкивания $0 \leq \Psi_0(r) \leq 1$, и согласно (1) имеем $|f^T(0)| < |f^B(0)|$; поэтому точное значение сечения рассеяния меньше рассчитанного по формуле борновского приближения.

Совершенно аналогично находим, что в случае б) $f^T(0) > f^B(0) > 0$ и борновское значение сечения меньше точного.

Подчеркнем, что полученные соотношения между точным и борновским значениями сечения рассеяния при $E = 0$ не предполагают малости потенциала, требуемой для применимости борновского приближения.

13.17. Подставляя в известное выражение для амплитуды рассеяния в центральном поле $U(r)$ в борновском приближении

$$f^B = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) \frac{\sin qr}{qr} r^2 dr$$

разложение

$$\frac{\sin qr}{qr} = \frac{\sin \sqrt{2k^2r^2 - 2k^2r^2 \cos \theta}}{\sqrt{2k^2r^2 - 2k^2r^2 \cos \theta}} = \frac{\pi}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [J_{l+1/2}(kr)]^2 P_l(\cos \theta),$$

представим ее в виде

$$f^B = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left\{ -\frac{\pi m}{k\hbar^2} \int_0^\infty U(r) [J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr \right\} P_l(\cos \theta). \quad (1)$$

Сравнивая выражение (1) с общим разложением точной амплитуды рассеяния по парциальным волнам при малых значениях фазовых сдвигов $|\delta_l(k)| \ll 1$ (именно малость фазовых сдвигов обеспечивает приближенно вещественность амплитуды рассеяния, как это имеет место в борновском приближении):

$$f^T = \sum_l (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos \theta) \approx \sum_l (2l+1) \frac{\delta_l(k)}{k} P_l(\cos \theta),$$

находим, что из равенства $f^r \approx f^B$ следует

$$\delta_l(k) \approx \delta_l^B(k) = -\frac{\pi m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) [J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr. \quad (2)$$

Выражение (2) представляет первый, линейный член разложения фазового сдвига по степеням взаимодействия.

13.18. Так как в борновском приближении амплитуды рассеяния для обменного и обычного потенциалов связаны соотношением $f_{обм}^B(\theta) = f_0^B(\pi - \theta)$ (см. 13.8), то разложение амплитуды $f_{обм}^B$ по парциальным волнам можно получить непосредственно из выражения (1) предыдущей задачи заменой θ на $(\pi - \theta)$. Так как при такой замене $P_l(\cos \theta)$ переходит в $(-1)^l P_l(\cos \theta)$, то, как легко сообразить, имея в виду выражение (2) предыдущей задачи, борновские фазовые сдвиги в случае обменного потенциала равны

$$\delta_{обм, l}^B(k) = -(-1)^l \frac{\pi m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) [J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr. \quad (1)$$

Появление в выражении (1) дополнительного множителя $(-1)^l$ по сравнению со случаем обычного потенциала легко понять, если учесть следующее свойство обменного взаимодействия $\hat{U}_{обм} \Psi(\mathbf{r}) = U(r) \Psi(-\mathbf{r})$: в состоянии с определенным значением орбитального момента l частицы это взаимодействие дает $\hat{U}_{обм} \Psi_l(\mathbf{r}) = U(r) \Psi_l(-\mathbf{r}) = (-1)^l U(r) \Psi_l(\mathbf{r})$, т. е. имеет обычный вид оператора умножения, причем потенциальная энергия в состояниях частицы с четными l и нечетными отличается знаком (если при четных l взаимодействие носит характер притяжения, то при нечетных l , наоборот, — характер отталкивания).

13.19. В выражении для фазового сдвига в борновском приближении

$$\delta_l^B(k) = -\frac{\pi m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) [J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr \quad (1)$$

при $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \rightarrow 0$ аргумент функции Бесселя $x = kr$ в области значений r , существенных в интеграле ($r \lesssim R$), мал ($x \ll 1$), и так как

$$J_{l+1/2}(x) \approx \frac{1}{\Gamma(l+3/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{l+1/2}, \quad x^2 \ll l+1/2,$$

то согласно (1) при $E \rightarrow 0$ имеем

$$\delta_l^B(k) \approx -\frac{\pi m}{\hbar^2 \Gamma^2(l+3/2)} \int_0^\infty U(r) r^{2l+2} dr (k/2)^{2l+1} \propto k^{2l+1}. \quad (2)$$

Очевидно, что полученное выражение (2) справедливо и в случае потенциалов, убывающих степенным образом: $U \propto r^{-\nu}$ при $r \rightarrow \infty$, но лишь для значений $l < (\nu - 3)/2$ (в противном случае интеграл в формуле (2) расходится).

Для потенциалов, не удовлетворяющих условию применимости борновского приближения $m|U_0|R^2/\hbar^2 \ll 1$, формула (2) несправедлива; однако, как известно, характер зависимости $\delta_l(k) \propto k^{2l+1}$ при $k \rightarrow 0$ сохраняется и в этом случае.

13.20. В выражении для фазового сдвига в борновском приближении

$$\delta_l^B(k) = -\frac{\pi m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r) [J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr \quad (1)$$

при $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \rightarrow \infty$ во всей области интегрирования, исключая узкую область малых значений r , аргумент функции Бесселя $x = kr$ велик: $x \gg 1$. Заменяя в формуле (1) функцию Бесселя ее асимптотическим выражением

$$J_{l+1/2}(x) \approx \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{1/2} \sin\left(x - \frac{\pi l}{2}\right), \quad x \gg (l + 1/2)^2,$$

находим при $k \rightarrow \infty$

$$\delta_l^B(k) \approx -\frac{2m}{k\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r) \sin^2\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) dr \approx -\frac{m}{k\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r) dr \quad (2)$$

(в интеграле быстро осциллирующий множитель $\sin^2\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)$ можно заменить его средним значением, равным $1/2$). Если же $U(r)$ при $r \rightarrow 0$ возрастает, как r^{-1} , или более резко, то выражение (2) неприменимо (интеграл расходится). Для таких потенциалов область малых значений r в интеграле выражения (1) является доминирующей, и замена в этой области функции Бесселя ее асимптотикой приводит к ошибочному результату.

Отметим, что если потенциал при всех значениях r ограничен, то при достаточно большой энергии частиц его всегда можно рассматривать как возмущение (всегда можно добиться выполнения неравенства $|U_0|R \ll \hbar v$), и для таких потенциалов асимптотическое поведение точных фазовых сдвигов при $E \rightarrow \infty$ дается формулой (2).

13.21. Квазиклассическое выражение для фазового сдвига [3]

$$\delta_l(k) = -\int_{r_0}^{\infty} \frac{mU(r) dr}{\hbar^2 \sqrt{k^2 - (l + 1/2)^2/r^2}}, \quad r_0 = \frac{l + 1/2}{k},$$

при $E \rightarrow \infty$ дает

$$\delta_l(k) \approx -\frac{m}{k\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r) dr \quad (1)$$

в согласии с результатом предыдущей задачи. Условием применимости выражения (1) является сходимость интеграла.

13.22. Фазовые сдвиги s -волн в борновском приближении равны

$$\delta_0(k) = -\frac{\pi m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} rU(r) J_{1/2}^2(kr) dr = -\frac{2m}{k\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r) \sin^2 kr dr. \quad (1)$$

Элементарное интегрирование дает:

$$a) \delta_0(k) = -\frac{2mRU_0 \sin^2 kR}{k\hbar^2};$$

$$б) \delta_0(k) = -\frac{4mR^3U_0k}{\hbar^2(1+4k^2R^2)}.$$

Условием применимости выражения (1) для не очень быстрых частиц ($kR \lesssim 1$) является его малость при $kR \sim 1$: $|\delta_0(kR \sim 1)| \ll 1$ (R — радиус потенциала). В рассматриваемых случаях это условие имеет вид $|U_0| \ll \hbar^2/mR^2$, как и следовало ожидать.

Знание фазовых сдвигов s -волн позволяет найти сечение рассеяния медленных частиц $kR \ll 1$ по формуле

$$\sigma \approx 4\pi [\delta_0(k)/k]^2, \quad k \rightarrow 0.$$

13.23. Так как по условию $|\delta_0(k)| \ll 1$ при всех энергиях, то потенциал является слабым и его можно рассматривать как возмущение. При этом фазовый сдвиг определяется выражением (см., например, 13.17)

$$\delta_0(k) = -\frac{2m}{k\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r) \sin^2 kr dr = -\frac{m}{k\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r) [1 - \cos 2kr] dr. \quad (1)$$

Умножим обе части равенства (1) на $(-k\hbar^2/2m)$, а затем проинтегрируем по k ; в результате получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dk} [k\delta_0(k)] = \int_0^{\infty} rU(r) \sin 2kr dr \equiv \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} rU(|r|) e^{-2ikr} dr \quad (2)$$

(потенциал $U(r)$ определен при $r > 0$; мы формально вводим в рассмотрение значения $r < 0$, определяя при этом функцию $U(r)$ соотношением $U(-|r|) = U(|r|)$). Аналогично, фазовый сдвиг определен лишь при $k > 0$, однако формула (1) позволяет рассматривать $\delta_0(k)$, также формально, и при $k \leq 0$; при этом $\delta_0(k) = -\delta_0(-k)$ — нечетная функция k).

Формула (2) определяет фурье-компоненту потенциала (точнее, величины $rU(|r|)$) и позволяет найти сам потенциал с помощью обратного преобразования Фурье:

$$rU(|r|) = \frac{i\hbar^2}{m} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dk} [k\delta_0(k)] e^{2ikr} d(2k). \quad (3)$$

Так как функция $d[\delta_0 k]/dk$ является нечетной (см. выше), то

$$U(r) = -\frac{2\hbar^2}{\pi m r} \int_0^{\infty} \frac{d}{dk} [k\delta_0(k)] \sin(2kr) dk \quad (r > 0). \quad (4)$$

Формулы (3) и (4) решают поставленную задачу.

а) В случае $\delta_0(k) = C = \text{const}$ (при $k > 0$) согласно (4) имеем

$$\begin{aligned} U(r) &= -\frac{2\hbar^2 C}{\pi m r} \int_0^{\infty} \sin(2kr) dk = -\frac{C\hbar^2}{\pi m r^2} \int_0^{\infty} \sin x dx = \\ &= -\frac{C\hbar^2}{\pi m r^2} \equiv -\frac{\alpha}{r^2}. \end{aligned}$$

б) Для указанного вида $\delta_0(k)$ имеем $\frac{d}{dk} [k\delta_0(k)] = \frac{2\alpha k}{[1 + \beta k^2]^2}$. Подставляя это выражение в формулу (3) и вычисляя интеграл с помощью теории вычетов (при $r > 0$ контур интегрирования можно замкнуть в верхней полуплоскости комплексной переменной k), находим

$$U(r) = -\frac{2\alpha\hbar^2}{m\sqrt{\beta^3}} e^{-2r/\sqrt{\beta}} \equiv U_0 e^{-r/R}.$$

13.24. Для вычисления фазового сдвига s -волны необходимо найти сферически симметричное (так как $l=0$) решение у. Ш. $\Psi_0(r)$, асимптотика которого при $r \rightarrow \infty$: $\Psi_0(r) \propto \frac{1}{r} \sin(kr + \delta_0)$ дает искомое значение $\delta_0(k)$.

а) У. Ш. при $r > R$ для функции $\chi(r)$, связанной с в. ф. Ψ_0 соотношением $\chi = r\Psi_0$, и его решение, удовлетворяющее граничному условию $\chi(R) = 0$, имеют вид

$$\chi'' + k^2\chi = 0, \quad \chi(r) = A \sin[k(r - R)]. \quad (1)$$

Из (1) следует $\delta_0(k) = -kR$.

б) Рассмотрим у. Ш. для функции $\chi = r\Psi_0$, легко находим его решение, удовлетворяющее граничному условию $\chi(0) = 0$, в виде

$$\chi(r) = \begin{cases} A \sin \kappa r, & r < R, \\ B \sin(kr + \delta_0(k)), & r > R, \end{cases} \quad (2)$$

$$\kappa = \sqrt{2m(E + U_0)/\hbar^2}.$$

Условия непрерывности в. ф. $\chi(r)$ (2) и ее производной в точке $r = R$ приводят к соотношению $\kappa \operatorname{ctg} \kappa R = k \operatorname{ctg} (kR + \delta_0)$, из которого следует

$$\delta_0(k) = -kR + \operatorname{arccctg} \left[\frac{\kappa}{k} \operatorname{ctg} \kappa R \right].$$

в) Если в. ф. $\Psi_0(r)$ представить в виде $\Psi_0 = \chi(r)/r$ и сделать замену переменной $x = \exp(-r/2R)$, то у. Ш. принимает вид

$$\frac{d^2}{dx^2} \chi + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \chi + \left[\lambda^2 - \frac{(ip)^2}{x^2} \right] \chi = 0, \quad (3)$$

где $\lambda = \sqrt{\frac{8mU_0R^2}{\hbar^2}}$, $p = \sqrt{\frac{8mER^2}{\hbar^2}} = 2kR$.

Уравнение (3) — уравнение Бесселя, и его общее решение имеет вид

$$\chi(x) = C_1 J_{ip}(\lambda x) + C_2 J_{-ip}(\lambda x).$$

Интересующее нас решение должно удовлетворять граничному условию $\chi(r=0) = \chi(x=1) = 0$. Оно имеет вид

$$\chi(x) = A [J_{-ip}(\lambda) J_{ip}(\lambda x) - J_{ip}(\lambda) J_{-ip}(\lambda x)]. \quad (4)$$

Фазовый сдвиг определяется асимптотикой в. ф. при $r \rightarrow \infty$ (при этом $x \rightarrow 0$):

$$\begin{aligned} \chi \propto \sin [kr + \delta_0] &\equiv \frac{1}{2i} [e^{ikr + i\delta_0} - e^{-ikr - i\delta_0}] = \\ &= \frac{1}{2i} [e^{i\delta_0} x^{-2ikR} - e^{-i\delta_0} x^{2ikR}]. \end{aligned} \quad (5)$$

Учитывая известное свойство функции Бесселя $J_\nu(x) \approx \frac{1}{\Gamma(1+\nu)} (x/2)^\nu$, $x \rightarrow 0$, находим поведение функции (4) при $x \rightarrow 0$:

$$\chi(x) \approx A \left[\frac{J_{-ip}(\lambda)}{\Gamma(1+ip)} \left(\frac{\lambda x}{2}\right)^{ip} - \frac{J_{ip}(\lambda)}{\Gamma(1-ip)} \left(\frac{\lambda x}{2}\right)^{-ip} \right]. \quad (6)$$

Сравнивая выражения (5) и (6), получаем

$$e^{2i\delta_0} = \frac{(\lambda/2)^{-ip} \Gamma(1+ip) J_{ip}(\lambda)}{(\lambda/2)^{ip} \Gamma(1-ip) J_{-ip}(\lambda)}. \quad (7)$$

В предельном случае нулевой скорости частиц сечение рассеяния может быть рассчитано по формуле $\sigma(E=0) = 4\pi (\delta_0(k)/k)_{k \rightarrow 0}^2$ и оказывается равным:

а) $\sigma = 4\pi R^2$;

б) $\delta_0(k) \approx k \left(-R + \frac{1}{\kappa_0} \operatorname{tg} \kappa_0 R \right)$ при $k \rightarrow 0$, $\kappa_0 = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$.

$$\sigma(E=0) = 4\pi R^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0R^2}} \operatorname{tg} \sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}} - 1 \right)^2. \quad (8)$$

Выражение (8) при $U_0 > 0$ дает сечение рассеяния частиц потенциальной ямой глубины U_0 и ширины R . При $U_0 < 0$ рассматриваемое поле представляет потенциальный барьер; при этом κ_0 — чисто мнимая величина. Представив κ_0 в виде $\kappa_0 \equiv i|\kappa_0|$ и учтя соотношение $\operatorname{tg} i|x| = i \operatorname{th}|x|$, находим сечение рассеяния частиц с нулевой энергией потенциальным барьером:

$$\sigma(E=0) = 4\pi R^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|U_0|R^2}} \operatorname{th} \sqrt{\frac{2m|U_0|R^2}{\hbar^2}} - 1 \right)^2. \quad (9)$$

При выполнении условия $|U_0| \ll \hbar^2/mR^2$ формулы (8), (9) дают

$$\sigma \approx \frac{16\pi R^2}{9} \left(\frac{mU_0 R^2}{\hbar^2} \right)^2 \ll \pi R^2,$$

что совпадает с результатом борновского приближения (см. 13.4, ∂).

∂) Поведение $\delta_0(k)$ при $k \rightarrow 0$ согласно формуле (7) легко найти, если воспользоваться следующими разложениями ($p = 2kR \rightarrow 0$):

$$\Gamma(1 \pm ip) \approx \Gamma(1) + \Gamma'(1)(\pm ip) \equiv 1 \mp 2ikRC, \quad (10)$$

$C = -\Gamma'(1) = 0,577$ — постоянная Эйлера,

$$(\lambda/2)^{\pm ip} = e^{\pm ip \ln(\lambda/2)} \approx 1 \pm ip \ln(\lambda/2) = 1 \pm 2ikR \ln(\lambda/2), \quad (11)$$

$$J_{\pm ip}(\lambda) \approx J_0(\lambda) \pm ip (dJ_\nu(\lambda)/d\nu)_{\nu=0}.$$

Для вычисления производной $dJ_\nu/d\nu$ воспользуемся известным из теории функций Бесселя соотношением

$$N_\nu(z) = \frac{J_\nu(z) \cos \nu\pi - J_{-\nu}(z)}{\sin \nu\pi}, \quad (12)$$

где N_ν — функция Неймана. При $\nu \rightarrow 0$ из (12) следует $\frac{d}{d\nu} [J_\nu(z)]_{\nu=0} = \frac{\pi}{2} N_0(z)$, и, таким образом,

$$J_{\pm ip}(\lambda) \approx J_0(\lambda) \pm \frac{ip\pi}{2} N_0(\lambda) = J_0(\lambda) \pm i\pi kR N_0(\lambda). \quad (13)$$

Учитывая соотношения (10), (11), (13), из формулы (7) при $k \rightarrow 0$ находим

$$e^{2i\delta_0} \approx 1 + 2i\delta_0(k) \approx 1 + 2ikR \left[\pi \frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)} - 2 \ln \frac{\lambda}{2} - 2C \right], \quad (14)$$

и сечение рассеяния частиц с энергией $E = 0$ оказывается равным

$$\sigma(E=0) = 16\pi R^2 \left[C + \ln \frac{\lambda}{2} - \frac{\pi}{2} \frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)} \right]^2. \quad (15)$$

При $U_0 < 0$ рассматриваемое поле является потенциальным барьером. В этом случае λ — чисто мнимая величина. Записав

$\lambda \equiv i|\lambda|$ и воспользовавшись известными формулами

$$I_0(|\lambda|) = J_0(i|\lambda|), \quad K_0(|\lambda|) = -\frac{\pi}{2} N_0(i|\lambda|) + \frac{i\pi}{2} I_0(|\lambda|),$$

$$\ln(i|\lambda|) = \ln|\lambda| + i\pi/2,$$

легко найти, как изменяются выражения (14), (15) при переходе от потенциальной ямы к барьеру. В частности, сечение рассеяния принимает вид

$$\sigma(E=0) = 16\pi R^2 \left[C + \ln \frac{|\lambda|}{2} + \frac{K_0(|\lambda|)}{I_0(|\lambda|)} \right]^2. \quad (16)$$

Читателю предлагается самостоятельно убедиться в том, что в случае $|U_0| \ll \hbar^2/mR^2$ сечение рассеяния, согласно формулам (15), (16), совпадает с результатом борновского приближения.

Полученные выше сечения рассеяния частиц с энергией $E=0$ определяют, вообще говоря, и рассеяние медленных частиц $kR \ll 1$. Исключением является случай резонансного рассеяния, когда $\sigma(E=0) \gg \pi R^2$. При этом, как известно, сечение рассеяния частиц в области малых энергий имеет резкую энергетическую зависимость.

13.25. В центральном поле $U(r)$, спадающем при $r \rightarrow \infty$ быстрее чем r^{-3} , решение у. Ш. при $E=0$ является сферически симметричным, что отражает то обстоятельство, что в пределе малой энергии частиц существенным является рассеяние лишь в s -состоянии. При этом асимптотика в. ф. при $r \rightarrow \infty$ имеет вид $\Psi \approx 1 - a/r$, где $a = -f(E=0)$ — длина рассеяния, $\sigma(0) = 4\pi a^2$.

Для рассматриваемого потенциала у. Ш. при $E=0$

$$\Delta \Psi(r) - \frac{2ma}{\hbar^2 r^4} \Psi(r) = 0, \quad \text{или} \quad \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \Psi - \frac{2ma}{\hbar^2 r^4} \Psi = 0,$$

заменой переменной $x = 1/r$ приводится к виду

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi - \frac{2ma}{\hbar^2} \Psi = 0$$

и имеет следующее решение, ограниченное при $r=0$ (при этом $x = \infty$):

$$\Psi = C \exp[-\sqrt{2ma/\hbar^2} x] = C \exp\left[-\frac{1}{r} \sqrt{2ma/\hbar^2}\right].$$

При $r \rightarrow \infty$ имеем $\Psi(r) \approx C \left[1 - \sqrt{\frac{2ma}{\hbar^2}} \frac{1}{r}\right]$, так что $a = \sqrt{\frac{2ma}{\hbar^2}}$, $\sigma(E=0) = \frac{8\pi ma}{\hbar^2}$.

13.26. Требуется решить у. Ш. ($E=0$)

$$\Delta \Psi(\mathbf{r}) = 0 \quad \left(\text{при} \quad \frac{x^2 + y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} > 1\right)$$

с граничным условием $\Psi(\mathbf{r}_0) = 0$ при $\frac{x_0^2 + y_0^2}{b^2} + \frac{z_0^2}{c^2} = 1$.

Асимптотика решения при $r \rightarrow \infty$ определяет длину рассеяния:

$$\Psi(\mathbf{r}) \approx 1 - a/r \quad (a = -f(E=0)).$$

Для функции $\varphi(\mathbf{r}) = 1 - \Psi$ уравнение, граничное и асимптотическое условия принимают вид

$$\begin{aligned} \Delta\varphi(\mathbf{r}) &= 0, \quad \varphi(\mathbf{r}) \approx a/r \quad \text{при } r \rightarrow \infty, \\ \varphi(\mathbf{r}_0) &= 1 \quad \text{при } \frac{x_0^2 + y_0^2}{b^2} + \frac{z_0^2}{c^2} = 1. \end{aligned} \quad (1)$$

Для определения значения a замечаем, что согласно (1) функцию $\varphi(\mathbf{r})$ можно рассматривать как электростатический потенциал заряженного проводящего эллипсоида вращения (ось вращения — ось z), потенциал которого равен $\varphi_0 = 1$; при этом $e = a$ — заряд эллипсоида. Так как потенциал и заряд связаны соотношением $e = C\varphi_0$, где C — емкость эллипсоида, то длина рассеяния частиц на «непроницаемом» эллипсоиде численно равна электростатической емкости проводника соответствующей формы*). Решение электростатической задачи (1) при $c > b$ известно и имеет вид

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{e}{2\sqrt{c^2 - b^2}} \ln \frac{z + \sqrt{c^2 - b^2} + \sqrt{[z + \sqrt{c^2 - b^2}]^2 + x^2 + y^2}}{z - \sqrt{c^2 - b^2} + \sqrt{[z - \sqrt{c^2 - b^2}]^2 + x^2 + y^2}} \quad (2)$$

(эту задачу легко можно решить методом изображений: потенциал проводящего эллипсоида вращения совпадает с потенциалом равномерно заряженного отрезка, концы которого находятся в фокусах эллипсоида с координатами $x=y=0, z=\pm\sqrt{c^2 - b^2}$). Определяя «заряд» e в формуле (2) из условия $\varphi_0 = 1$ на поверхности эллипсоида (при этом $a = e$), имеем

$$a = 2\sqrt{c^2 - b^2} \left[\ln \frac{c + \sqrt{c^2 - b^2}}{c - \sqrt{c^2 - b^2}} \right]^{-1} \quad (3)$$

(для определения потенциала удобно взять точку эллипсоида, лежащую на оси z , координаты которой $x = y = 0, z = c$).

При $c = b$ из формулы (3) имеем $a = c, \sigma(E=0) = 4\pi c^2$ — известный результат для рассеяния медленных частиц на непроницаемой сфере радиуса $R = c$.

При $c \gg b$ формула (3) дает

$$a \approx \frac{c}{\ln(2c/b)}, \quad \sigma(E=0) = \frac{4\pi c^2}{\ln^2(2c/b)}.$$

*) Очевидно, соотношение $a = C$ сохраняется и при рассеянии частиц с $E = 0$ на «непроницаемом» теле произвольной формы; при этом C — электростатическая емкость проводника, имеющего такую же форму. В частности, при рассеянии частиц на непроницаемом диске радиуса R сечение рассеяния оказывается равным $\sigma(E=0) = (16/\pi)R^2$ (емкость диска $C = 2R/\pi$).

13.27. Из формулы для амплитуды рассеяния (см., например, 13.1)

$$f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}r} U(r) \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(r) dV \quad (1)$$

следует, что в случае полей $U(r)$, имеющих указанный вид на больших расстояниях, она при $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| = 2k \sin(\theta/2) \rightarrow 0$ неограниченно возрастает. Действительно, ввиду медленного убывания подынтегральной функции в выражении (1) при $r \rightarrow \infty$, где $\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(r) \approx e^{i\mathbf{k}_0 r}$, в интеграле (1) при малых значениях q доминирующую роль играет область больших расстояний. При этом

$$f \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{r>R} \frac{\alpha}{r^n} e^{-iqr} dV = -\frac{2m\alpha}{q\hbar^2} \int_R^\infty \frac{\sin qr}{r^{n-1}} dr \quad (2)$$

(вклад области интегрирования $r < R$ при $q \rightarrow 0$ не представляет интереса, так как он имеет конечную величину и пренебрежимо мал по сравнению с расходящимся выражением (2)).

Выражение (2) удобно переписать в виде

$$f \approx -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q^{3-n}} \int_{qR}^\infty \frac{\sin x}{x^{n-1}} dx. \quad (3)$$

При $n < 3$ в этом интеграле нижний предел ($qR \ll 1$) можно заменить нулем, и, так как

$$C_n = \int_0^\infty \frac{\sin x}{x^{n-1}} dx = \left(\sin \frac{\pi n}{2}\right) \Gamma(2-n) = -\frac{\pi \sin(\pi n/2)}{\Gamma(n-1) \sin(\pi n)}, \quad (4)$$

амплитуда рассеяния при малых значениях q оказывается равной

$$f = \tilde{C}_n / q^{3-n}, \quad \tilde{C}_n = \frac{m\alpha\pi}{\hbar^2 \Gamma(n-1) \cos(\pi n/2)}. \quad (5)$$

При рассеянии медленных частиц ($E \rightarrow 0$) для всех углов рассеяния справедливо выражение (5), и сечение рассеяния равно

$$\begin{aligned} \sigma &= \int |f|^2 d\Omega = 2\pi \tilde{C}_n^2 \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{[4k^2 \sin^2(\theta/2)]^{3-n}} = \\ &= 2\pi \tilde{C}_n^2 \left(\frac{\hbar^2}{4mE}\right)^{3-n} \int_{-1}^1 \frac{dz}{(1-z)^{3-n}} \propto E^{-(3-n)} \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

13.28. Задача решается аналогично предыдущей. Однако в формуле (3) при $n = 3$ теперь нельзя заменять нулем нижний предел интегрирования ввиду расходимости интеграла на этом пределе. Так как значение этого интеграла определяется областью малых x , где $\sin x \approx x$, то расходящуюся при $q \rightarrow 0$ часть амплитуды рассеяния легко вычислить:

$$\begin{aligned} f &\approx -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \int_{qR}^{\infty} \frac{\sin x}{x^2} dx = \\ &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \left\{ \int_{qR}^{a \ll 1} \frac{dx}{x} + \int_a^{\infty} \frac{\sin x}{x^2} dx \right\} \approx \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \ln(qR). \end{aligned}$$

Так как $q = 2k \sin(\theta/2)$, то полное сечение рассеяния медленных частиц оказывается равным

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega \approx \int \frac{4m^2\alpha^2}{\hbar^4} \ln^2(kR) d\Omega = \frac{16\pi m^2\alpha^2}{\hbar^4} \ln^2(kR) \rightarrow \infty.$$

13.29. Представив общую с. ф. операторов \hat{H} , \hat{l}^2 , \hat{l}_z в виде $\Psi_{klm}(\mathbf{r}) = \chi_{kl}(r) Y_{lm}/\sqrt{r}$, имеем для функции χ_{kl} уравнение

$$\chi_{kl}'' + \frac{1}{r} \chi_{kl}' + \left\{ k^2 - \frac{1}{r^2} \left[(l + 1/2)^2 + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \right] \right\} \chi_{kl} = 0.$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее граничному условию $\chi(0) = 0$:

$$\chi_{kl}(r) = C J_{\nu}(kr),$$

где J_{ν} — функция Бесселя с индексом ν , равным $\nu = \sqrt{(l + 1/2)^2 + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}}$, имеет при $r \rightarrow \infty$ асимптотическое поведение

$$\begin{aligned} \chi_{kl} &\approx C \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin \left[kr - \frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{4} \right] = \\ &= C \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin \left[kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right]. \quad (1) \end{aligned}$$

Из (1) находим фазовые сдвиги:

$$\delta_l = -\frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{2} (l + 1/2) = -\frac{\pi}{2} \left[\sqrt{(l + 1/2)^2 + 2m\alpha/\hbar^2} - (l + 1/2) \right], \quad (2)$$

которые позволяют рассчитать амплитуду рассеяния:

$$f(E, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta). \quad (3)$$

а) В случае $m\alpha/\hbar^2 \ll 1$ согласно (2) имеем

$$\delta_l \approx -\frac{\pi m\alpha}{\hbar^2(2l+1)}, \quad |\delta_l| \ll 1, \quad (4)$$

и, разлагая в выражении (3) экспоненту в ряд, получаем

$$f(E, \theta) \approx -\frac{\pi m\alpha}{k\hbar^2} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) = -\frac{\pi m\alpha}{2k\hbar^2 \sin(\theta/2)}. \quad (5)$$

При суммировании ряда мы воспользовались производящей функцией для полиномов Лежандра (положив в ней $z = \cos \theta$, $x = 1$):

$$(1 - 2xz + x^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} x^l P_l(z).$$

Дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{\pi^2 m\alpha^2}{8\hbar^2 E \sin^2(\theta/2)} \quad (6)$$

имеет мало общего с результатом, даваемым классической механикой (см. [4]):

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} = \frac{\pi^2 \alpha}{E} \frac{\pi - \theta}{\theta^2 (2\pi - \theta)^2 \sin \theta}. \quad (7)$$

Выражения (5) и (6) совпадают, как и следовало ожидать, с результатом борновского приближения, см. 13.4, г.

б) В случае $m\alpha/\hbar^2 \gtrsim 1$ ряд (3) с фазовыми сдвигами (2) при произвольном угле рассеяния просуммировать не удастся. Легко заметить, однако, что для достаточно малых углов рассеяния сохраняют силу выражения (5) и (6). Это связано с тем, что при $\theta \rightarrow 0$ амплитуда рассеяния неограниченно возрастает по абсолютной величине. Так как каждый член ряда (3) ограничен, то расходимость амплитуды означает, что в сумме (3) существенны слагаемые с большими значениями l (тем большими, чем меньше угол рассеяния). Но при достаточно больших l справедливо представление (4) фазовых сдвигов, из которого и вытекают формулы (5), (6). Таким образом, при достаточно малых углах рассеяния, независимо от значения параметра $m\alpha/\hbar^2$, амплитуда рассеяния определяется борновским выражением (это — естественный результат, так как в данной задаче при рассеянии под малыми углами существенны большие расстояния, на которых $U(r) = \alpha/r^2 \ll \hbar v/r$, т. е. выполнено условие применимости борновского приближения).

в) Так как $\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) = 4\delta(1 - \cos \theta)$, т. е. такая сумма равна нулю при $\theta \neq 0$, и так как $P_l(-1) = (-1)^l$, то вы-

ражение (3) с учетом (2) при $\theta = \pi$ можно записать в виде

$$f(E, \theta = \pi) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp[-i\pi \sqrt{(l+1/2)^2 + 2m\alpha/\hbar^2}]. \quad (8)$$

При $m\alpha/\hbar^2 \gg 1$ в этой сумме основную роль играют слагаемые с большими значениями $l \leq \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^{1/4}$ *, причем соседние слагаемые суммы, отличающиеся по l на единицу, мало отличаются друг от друга. Поэтому суммирование в формуле (8) можно заменить интегрированием:

$$f(E, \pi) \approx \frac{1}{k} \int_0^{\infty} l \exp[-i\pi \sqrt{l^2 + 2m\alpha/\hbar^2}] dl.$$

Заменой переменной $x = \sqrt{l^2 + 2m\alpha/\hbar^2}$ этот интеграл преобразуется к виду

$$f(E, \pi) = \frac{1}{k} \int_{\sqrt{2m\alpha/\hbar^2}}^{\infty} x \exp(-i\pi x) dx, \quad (9)$$

и так как

$$\int_{x_0}^{\infty} x e^{-ax} dx = -\frac{\partial}{\partial a} \int_{x_0}^{\infty} e^{-ax} dx = \frac{(1+ax_0)}{a^2} e^{-ax_0} \text{ при } \operatorname{Re} a \geq 0,$$

то выражение (9) для амплитуды рассеяния назад ($\theta = \pi$) оказывается равным

$$f(E, \pi) = \frac{-i\sqrt{2m\alpha}}{\pi\hbar k} \exp\left[-i\pi \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}}\right].$$

При этом дифференциальное сечение рассеяния назад, как легко заметить, совпадает с результатом (7) классической механики для $\theta = \pi$.

13.30. Стандартное выражение для фазовых сдвигов в квазиклассическом приближении имеет вид

$$\delta_l = \int_{r_0}^{\infty} \left[\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U(r)) - \frac{\hbar^2(l+1/2)^2}{r^2}} - k \right] dr + \frac{\pi}{2} (l+1/2) - kr_0, \quad (1)$$

где r_0 — точка поворота.

В рассматриваемой задаче во всей области интегрирования $U = 0$. В этом случае интеграл в (1) легко вычисляется ин-

*) При больших значениях l слагаемые суммы (8) начинают быстро осциллировать и соответствующая часть суммы оказывается малой.

тегрированием по частям и оказывается равным ($\bar{l} \equiv l + 1/2$)

$$\int_{r_0}^{\infty} [\sqrt{k^2 - \bar{l}^2/r^2} - k] dr = r [\sqrt{k^2 - \bar{l}^2/r^2} - k] \Big|_{r_0}^{\infty} + \\ + \bar{l} \int_{r_0}^{\infty} \frac{d(\bar{l}/r)}{\sqrt{k^2 - \bar{l}^2/r^2}} = -r_0 (\sqrt{k^2 - \bar{l}^2/r_0^2} - k) - \bar{l} \arcsin \frac{\bar{l}}{kr_0}.$$

Соответственно

$$\delta_l = (l + 1/2) \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin \frac{l + 1/2}{kr_0} \right) - r_0 \sqrt{k^2 - \frac{(l + 1/2)^2}{r_0^2}}. \quad (2)$$

При $l + 1/2 > kR$ имеем $r_0 = (l + 1/2)/k$ и согласно (2)

$$\delta_l = 0, \quad l > l_0 \equiv kR - 1/2. \quad (3)$$

При $l + 1/2 < kR$ имеем $r_0 = R$ и

$$\delta_l = (l + 1/2) \arccos \frac{l + 1/2}{kR} - R \sqrt{k^2 - \frac{(l + 1/2)^2}{R^2}}, \quad l < l_0. \quad (4)$$

Смысл равенства (3): при $l > l_0$ точные фазовые сдвиги экспоненциально малы, а квазиклассическое приближение такую точность не обеспечивает.

Выражение (4) в рассматриваемом случае следует уточнить. Оно получено из квазиклассического выражения (1), при выводе которого было учтено, что квазиклассика нарушается вблизи точек остановки. В данной же задаче квазиклассика справедлива, вообще говоря, на всем интервале $r \geq R$ (вплоть до самой точки поворота $r_0 = R$). Внимательный читатель сообразит, имея в виду общие формулы квазиклассики с учетом условий сшивания, что в выражение (4) в этом случае следует ввести дополнительное слагаемое, равное $(-\pi/4)^*$. Он также заметит, что полученные выражения (3) и (4) неприменимы при $l \approx l_0 \approx kR$, так как в этом случае нужно быть более аккуратным в вопросе сшивания решений вблизи точки поворота (это обстоятельство несущественно для дальнейших вычислений).

С учетом (3) амплитуда рассеяния может быть записана в виде

$$f(E, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{l_0} (2l + 1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta). \quad (5)$$

Полное сечение рассеяния согласно оптической теореме равно

$$\sigma(E) = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(E, \theta = 0) = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l + 1) (1 - \cos 2\delta_l). \quad (6)$$

*) Это — те же самые « $-\pi/4$ », которые привели к модификации правила квантования Бора — Зоммерфельда в 9.2.

Фазовые сдвиги (4) велики: $|\delta_l| \gg 1$ — и изменяются на величину порядка единицы уже при переходе от значения l к $l+1$. Поэтому слагаемые суммы (6), содержащие $\cos 2\delta_l$, быстро осциллируют и вся соответствующая часть суммы оказывается малой. Пренебрегая ею, получаем для полного сечения выражение ($l_0 \approx kR \gg 1$)

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) = \frac{2\pi}{k^2} \frac{(2l_0+1)+1}{2} (l_0+1) \approx 2\pi R^2,$$

т. е. значение, превышающее в два раза классическое сечение.

13.31. Исходим из выражений (5) и (4) решения предыдущей задачи. При произвольном значении θ слагаемые суммы в выражении для амплитуды рассеяния быстро осциллируют уже при небольшом изменении l как за счет фактора $e^{2i\delta_l}$, так и за счет осциллирующей полиномов Лежандра как функций l при фиксированном значении θ (напомним, что в задаче существенны большие значения l). Однако в области малых углов рассеяния осцилляции полиномов Лежандра менее значительны (при $\theta = 0$ они вообще отсутствуют, так как $P_l(1) \equiv 1$), и поэтому в сумме наиболее сильно будут «погашаться» слагаемые, содержащие множитель $e^{2i\delta_l}$. Соответственно, записав амплитуду рассеяния в виде *)

$$f = f_{\text{диф}} + f_{\text{кл}}, \quad (1)$$

где

$$f_{\text{диф}} = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) P_l(\cos \theta), \quad f_{\text{кл}} = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) e^{2i\delta_l} P_l(\cos \theta), \quad (2)$$

можно утверждать, что для достаточно малых углов рассеяния $f \approx f_{\text{диф}}$. Воспользовавшись известной формулой (J_0 — функция Бесселя)

$$P_l(\cos \theta) \approx J_0[(l + 1/2)\theta], \quad l \gg 1 \quad \text{и} \quad \theta \ll 1,$$

*) Поясним, имея в виду дальнейшее рассмотрение данной и следующей задач, смысл используемого разбиения амплитуды на «дифракционную» и «классическую» части. В области малых углов (фактически $\theta \ll (kR)^{-1/3} \ll 1$) $|f_{\text{диф}}| \gg |f_{\text{кл}}|$, при этом вклад рассеяния под такими углами (фактически $\theta \leq (kR)^{-1}$) в полное сечение составляет πR^2 . В области же не слишком малых углов $\theta \gg (kR)^{-1/3}$ (при этом может быть $\theta \ll 1$) пренебрежимо мала часть $f_{\text{диф}}$. При этом $f_{\text{кл}}$ описывает изотропное распределение рассеянных частиц: $d\sigma/d\Omega \approx |f_{\text{кл}}|^2 \approx R^2/4$, так что сечение рассеяния под такими углами также составляет πR^2 (как и в классической механике). Наконец, в области углов $\theta \sim (kR)^{-1/3}$ амплитуды $f_{\text{диф}}$ и $f_{\text{кл}}$ одного порядка. При таких углах рассеяния для $f_{\text{кл}}$ не удается получить простого выражения; вклад же в сечение этой области углов пренебрежимо мал по сравнению с πR^2 .

имеем

$$f_{\text{диф}} \approx \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) J_0[(l+1/2)\theta]. \quad (3)$$

Нетрудно заметить, что слагаемые суммы (3) при изменении l на единицу мало изменяются, так что суммирование можно заменить интегрированием. При этом, воспользовавшись известной формулой

$$\int x J_0(x) dx = x J_1(x),$$

получаем ($l_0 \approx kR \gg 1$)

$$f_{\text{диф}} \approx \frac{i}{2k} \int_0^{l_0} (2l+1) J_0[(l+1/2)\theta] dl \approx \frac{iR}{\theta} J_1(kR\theta). \quad (4)$$

Амплитуда дифракционного рассеяния — чисто мнимая. Она, как и дифференциальное сечение рассеяния, является осциллирующей функцией θ , причем расстояние между соседними нулями (или максимумами) $|f_{\text{диф}}|$ имеет порядок величины $\Delta\theta \sim (kR)^{-1}$. Так как

$$J_1(x) \approx \frac{x}{2} \text{ при } x \ll 1 \text{ и } J_1(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \text{ при } x \gg 1,$$

то согласно (4) легко находим

$$\left. \frac{d\sigma_{\text{диф}}}{d\Omega} \right|_{\theta \ll (kR)^{-1}} \approx \frac{(kR)^2}{4} R^2, \quad \left. \frac{d\sigma_{\text{диф}}}{d\Omega} \right|_{(kR)^{-1} \ll \theta \ll 1} \approx \frac{2R \sin^2(kR\theta - \pi/4)}{\pi k \theta^3}. \quad (5)$$

Наибольшую величину дифференциальное сечение имеет в области углов $\theta \leq (kR)^{-1}$ и быстро падает с увеличением θ при $\theta > (kR)^{-1}$. Это резкое уменьшение величины $d\sigma/d\Omega$ объясняется сильной взаимной компенсацией большого числа слагаемых в выражении (1) из-за знакопеременности полиномов Лежандра.

Полное сечение дифракционного рассеяния легко найти (вос-

пользовавшись формулой $\int_0^{\infty} J_1^2(x) x^{-1} dx = 1/2$):

$$\sigma_{\text{диф}} = \int |f_{\text{диф}}|^2 d\Omega \approx 2\pi R^2 \int_0^{\infty} \frac{J_1^2(kR\theta)}{\theta} d\theta = 2\pi R^2 \int_0^{\infty} \frac{J_1^2(x)}{x} dx = \pi R^2, \quad (6)$$

т. е. оно составляет половину полного сечения рассеяния (интегрирование в (6) следует проводить по области углов, в

которой $|f_{\text{диф}}| \gg |f_{\text{кл}}|$; однако $|f_{\text{диф}}|^2$ существенно велико лишь при $\theta \leq (kR)^{-1}$, так что верхний предел интегрирования по θ можно взять равным бесконечности).

13.32. Рассмотрим часть $f_{\text{кл}}$ амплитуды рассеяния, определяемую формулой (2) предыдущей задачи:

$$f_{\text{кл}} = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) e^{2i\delta_l} P_l(\cos \theta), \quad (1)$$

где δ_l даются формулой (4) задачи 13.30.

Так как в выражении (1) существенны $l \gg 1$ и нас интересуют углы рассеяния $\theta \gg l^{-1} \sim (kR)^{-1}$ (для углов $\theta \leq (kR)^{-1}$ заведомо $|f_{\text{кл}}| \ll |f_{\text{диф}}|$ и $f_{\text{кл}}$ не представляет особого интереса), то, воспользовавшись асимптотическим выражением для полиномов Лежандра

$$P_l(\cos \theta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi(l+1/2)}} \frac{\sin[(l+1/2)\theta + \pi/4]}{\sqrt{\sin \theta}},$$

$$l \gg 1, \quad \theta \gg 1/l, \quad (\pi - \theta) \gg 1/l,$$

(1) можно записать в виде

$$f_{\text{кл}} = -\frac{1}{2k\sqrt{\pi}\sin\theta} \sum_{l=0}^{l_0} \sqrt{2l+1} [e^{i\varphi_+(l)} - e^{i\varphi_-(l)}], \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_{\pm}(l) &= 2\delta_l \pm [(l+1/2)\theta + \pi/4] = \\ &= (2l+1) \arccos \frac{2l+1}{2kR} - 2\sqrt{k^2R^2 - (l+1/2)^2} \pm [(l+1/2)\theta + \pi/4]. \end{aligned} \quad (3)$$

Из-за быстрой осцилляции экспоненциальных сомножителей большинство членов суммы (2) взаимно уничтожается. Сумма будет в основном определяться областями значений l , близких к тем, при которых одна из экспонент имеет экстремум как функция l . Из условия экстремума

$$\frac{\partial \varphi_{\pm}}{\partial l} = 2 \arccos \frac{l+1/2}{kR} \pm \theta = 0 \quad (4)$$

следует, что имеется только один экстремум — у экспоненты с фазой φ_- , причем экстремальное значение l переменной l равно

$$\bar{l} + 1/2 = kR \cos(\theta/2), \quad (5)$$

что в точности соответствует классической связи между прицельным параметром $\rho = M/p = \hbar(l+1/2)/\hbar k = (l+1/2)/k$ и углом рассеяния θ : $\rho = R \cos(\theta/2)$.

Учитывая (3)–(5), легко получить разложение $\varphi_-(l)$ в ряд вблизи точки экстремума:

$$\begin{aligned} \varphi_-(l) &= \varphi_-(\bar{l}) + \frac{1}{2!} \varphi_-'(\bar{l})(l - \bar{l})^2 + \frac{1}{3!} \varphi_-'-(\bar{l})(l - \bar{l})^3 + \dots = \\ &= \left(-2kR \sin \frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{(l - \bar{l})^2}{kR \sin(\theta/2)} - \frac{\cos(\theta/2)}{3(kR)^2 \sin^3(\theta/2)} (l - \bar{l})^3 + \dots \end{aligned} \quad (6)$$

При вычислении суммы (2) слагаемыми с фазой φ_+ , не имеющей экстремума, можно пренебречь, а значение оставшейся суммы определяется узкой областью значений l вблизи точки экстремума. Ширина области $\Delta l = l - \bar{l}$ определяется условием, чтобы изменение фазы экспоненты $\Delta\varphi_- = \varphi_-(l) - \varphi_-(\bar{l})$ удовлетворяло неравенству $|\Delta\varphi_-| \leq 1$ (иначе опять начинаются осцилляции). Изменение фазы $\Delta\varphi_-$ в указанной области определяется в основном вторым слагаемым в формуле (6), и поэтому, учитывая сказанное выше, выражение (2) можно записать в виде *)

$$f_{\text{кл}} \approx \sqrt{\frac{R}{4\pi k \sin(\theta/2)}} e^{i\varphi_-(\bar{l})} \sum_{l=0}^{l_0} \exp\left[-\frac{i(l - \bar{l})^2}{kR \sin(\theta/2)}\right]. \quad (7)$$

Существенный вклад в сумму (7) вносят лишь слагаемые, для которых $|\Delta l| = |l - \bar{l}| \leq \sqrt{kR \sin(\theta/2)}$. При этом изменение $|\Delta\varphi_-|$ за счет третьего слагаемого в формуле (6) (которым мы пренебрегли) равно

$$\frac{1}{3} \frac{\cos(\theta/2)}{(kR)^2 \sin^3(\theta/2)} |\Delta l|^3 \leq \frac{1}{\sqrt{kR}} \frac{\cos(\theta/2)}{[\sin(\theta/2)]^{1/2}}, \quad (8)$$

и условие малости величины (8) по сравнению с единицей определяет область применимости разложения (6) и тем самым — справедливости выражения (7):

$$\sqrt{kR\theta^3} \gg 1, \text{ или } \theta \gg (kR)^{-1/3} \text{ **} \quad (9)$$

это условие более жесткое, чем условие $\theta \gg l^{-1} \sim (kR)^{-1}$; тем не менее оно справедливо для большей части интересующей нас области углов).

С помощью (5) и (9) легко находим $(l_0 - \bar{l}) \gg \sqrt{kR \sin(\theta/2)}$, так что суммирование в (7) можно проводить до бесконечности.

*) При этом предэкспоненциальный множитель $\sqrt{2l+1}$ вынесен за знак суммы в точке $l = \bar{l}$.

**) Внимательный читатель заметит, что, наряду с ограничением (9) на углы рассеяния, проводимое исследование предполагает также выполненным условие $(\pi - \theta) \gg (kR)^{-1/2}$ (в противном случае незаконно вынесение за знак суммы предэкспоненциального множителя $\sqrt{2l+1}$ и т. д.). Однако окончательный результат (10) справедлив и при $\theta \rightarrow \pi$. Это легко подтвердить вычислением, аналогичным проведенному при решении задачи 13.29, а.

Заменяя также нижний предел $l = 0$ в сумме на $l = -\infty$ и переходя от суммирования к интегрированию, легко находим

$$f_{\text{кл}} \approx \sqrt{\frac{R}{4\pi k \sin(\theta/2)}} e^{i\varphi - (i)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{i(l - \bar{l})^2}{kR \sin(\theta/2)}\right] dl =$$

$$= \frac{-iR}{2} e^{-2ikR \sin(\theta/2)} \quad (10)$$

(замена суммирования интегрированием законна, так как в существенной области число слагаемых велико: $\sim \sqrt{kR \sin(\theta/2)} \gg 1$, а при изменении l на единицу слагаемые суммы почти не изменяются).

С помощью (10) находим дифференциальное сечение рассеяния в области углов $\theta \gg (kR)^{-1/3}$ и полное сечение рассеяния (под указанными углами):

$$\frac{d\sigma_{\text{кл}}}{d\Omega} = |f_{\text{кл}}|^2 = \frac{R^2}{4},$$

$$\sigma_{\text{кл}} \approx \pi R^2, \quad (11)$$

совпадающие с результатом классической механики.

В заключение приведем рис. 38, иллюстрирующий качественную зависимость дифференциального сечения $d\sigma/d\Omega$

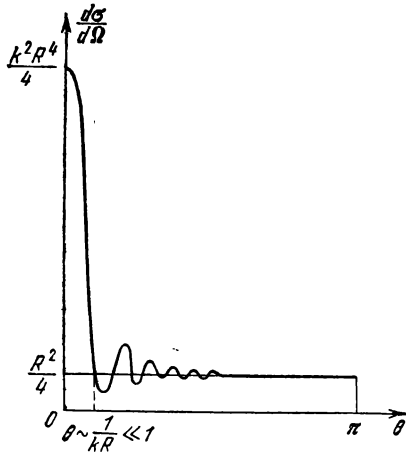


Рис. 38.

от угла θ при рассеянии быстрых частиц $kR \gg 1$ (фактически считается выполненным более жесткое условие $(kR)^{1/3} \gg 1$) на непроницаемой сфере согласно результатам данной и предыдущей задач.

13.33. Для нахождения длины рассеяния a требуется решить у. Ш. при $E = 0$. Это решение является сферически симметричным, и его асимптотика при $r \rightarrow \infty$: $\Psi \approx 1 - a/r$ — дает значение a . Полагая $\Psi = \chi(r)/r$, легко находим из у. Ш. вид χ и в. ф. $\Psi(r)$:

$$a) \Psi(r) = \begin{cases} \frac{A}{r} \sin\left(\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}} r\right), & r < R, \\ 1 - \frac{a}{r}, & r > R; \end{cases}$$

$$б) \Psi(r) = \begin{cases} C, & r < R, \\ 1 - \frac{a}{r}, & r > R. \end{cases}$$

Условия сшивания в. ф. в точке $r = R$ дают:

$$\begin{aligned} a) \quad a &= R \left(1 - \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0R^2}} \operatorname{tg} \sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}} \right); \\ б) \quad a &= R \left(1 - \frac{1}{1 - 2mU_0R^2/\hbar^2} \right) \end{aligned} \quad (1)$$

(в случае a в точке $r = R$ непрерывна функция χ (как и Ψ) и ее производная; в случае $б$ функция χ непрерывна, а ее производная имеет скачок, определяемый решением задачи 2.10).

Согласно (1) при некоторых значениях параметров поля, точнее — их безразмерной комбинации $\xi = 2mU_0R^2/\hbar^2$, длина рассеяния (а с нею и полное сечение $\sigma(E=0) = 4\pi a^2$) обращается в бесконечность. Это имеет место при значениях параметра ξ , равных: $a) \xi_n = \pi^2(n + 1/2)^2, n = 0, 1, 2, \dots$; $б) \xi_0 = 1$, т. е. таких значениях ξ , при которых в ходе «углубления» потенциальной ямы в ней появляются новые состояния д. с. с моментом $l = 0$ (сравнить в случае $б$) с результатом задачи 4.34).

С другой стороны, в случае $a)$ при значениях параметра ξ , удовлетворяющих условию $\operatorname{tg} \sqrt{\xi} = \sqrt{\xi}$, наоборот, $a = 0$, т. е. $\sigma(E=0) = 0$ (а сечение рассеяния медленных частиц, соответственно, аномально мало).

13.34. Представив в. ф. s -состояния ($l=0$) в виде $\Psi = \chi(r)/r$, из у. Ш. легко находим функцию χ (а с нею и Ψ):

$$\Psi(r) = \begin{cases} \frac{A}{r} \sin kr, & r < R, \\ \frac{1}{r} (S_0 e^{ikr} - e^{-ikr}), & r > R, \end{cases}$$

где $S_0 = e^{2i\delta_0}$. Из условий сшивания в. ф. в случае δ -функционального потенциала (см. 2.10) получаем после простых, хотя и несколько громоздких алгебраических преобразований

$$e^{2i\delta_0} = \frac{g(k) + ikR}{g(k) - ikR}, \quad (1)$$

где

$$g(k) = \frac{kR(kR - \tilde{\alpha}R \sin kR \cos kR)}{\tilde{\alpha}R \sin^2 kR} \quad \left(\tilde{\alpha} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \right). \quad (2)$$

В случае медленных частиц $kR \ll 1$ полное сечение рассеяния определяется в основном парциальным сечением с $l=0$ *):

$$\sigma \approx \sigma_{l=0} = 4\pi \left| \frac{S_0 - 1}{2ik} \right|^2 = \frac{4\pi R^2}{g^2(k) + k^2 R^2}. \quad (3)$$

Величина сечения (3) и его энергетическая зависимость при $kR \ll 1$ определяются величиной

$$g(0) = -1 + \frac{1}{\tilde{\alpha}R} \equiv -1 + \frac{\hbar^2}{2m\alpha R}. \quad (4)$$

*) Напомним, что поправка к выражению (3), связанная с рассеянием в p -волне, $\sigma_{l=1} \propto k^4$.

Если $|g'(0)| \gg 1$, то зависимость (3) от k является «вялой» и ею можно пренебречь, так что в этом случае

$$\sigma(E) \approx \sigma(E=0) = 4\pi R^2/g^2(0)$$

(хотя учет в (3) члена порядка k^2 (но не k^4) и является законным).

Если же $|g(0)| \ll 1$, то слагаемое $k^2 R^2$ в знаменателе выражения (3) существенно влияет на величину сечения, и в этом случае *)

$$\sigma(E) \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m(\varepsilon + E)}, \quad (5)$$

где

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2mR^2} g^2(0) \ll \frac{\hbar^2}{2mR^2} \quad (6)$$

представляет величину энергии мелкого реального (или виртуального) уровня частицы, существующего в поле в случае $|g(0)| \ll 1$. Читателю предлагается самостоятельно из решения у.Ш. для состояний д.с. ($E < 0$) убедиться в том, что в случае $|g(0)| \ll 1$, $g(0) < 0$ в рассматриваемом поле действительно имеется мелкий уровень д.с. с энергией $E \approx -\varepsilon$ (см., например, 4.34; при этом следует учесть, что функции $I_{1/2}$ и $K_{1/2}$ просто выражаются через элементарные).

13.35. Из решения у.Ш. следует вид в.ф:

$$\Psi(r) = \begin{cases} \frac{A}{r} \sin \kappa r, & r < R \quad (\kappa = \sqrt{2m(E + U_0)/\hbar^2}), \\ \frac{1}{r} (S_0 e^{i\kappa r} - e^{-i\kappa r}), & r > R, \end{cases}$$

где $S_0 = e^{2i\delta_0}$. Из условия непрерывности в.ф. и ее производной при $r = R$ находим (удобнее сшивать функцию $\chi = \Psi r$, а не непосредственно Ψ)

$$e^{2i\delta_0} = \frac{g(k) + ikR}{g(k) - ikR}, \quad (1)$$

где

$$g(k) = \frac{\kappa R \cos kR + kR \sin kR \operatorname{tg} \kappa R}{\operatorname{tg} \kappa R \cos kR - \frac{\kappa}{k} \sin kR}. \quad (2)$$

Характер энергетической зависимости сечения рассеяния медленных частиц $kR \ll 1$ определяется значением $g(0)$ (сравнить с предыдущей задачей). В случае $|g(0)| \gg 1$ сечение слабо зависит от энергии и равно $\sigma(E) \approx 4\pi R^2 g^{-2}(0)$. При $|g(0)| \ll 1$ энергетическая зависимость сечения имеет вид

$$\sigma(E) \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m(\varepsilon + E)}, \quad (3)$$

где

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2mR^2} g^2(0) \ll \frac{\hbar^2}{2mR^2}. \quad (4)$$

*) Это выражение можно уточнить, учтя в разложении $g(k)$ член порядка k^2 , т. е. записав $g(k) \approx g(0) + Ck^2$.

Условие $|g(0)| \ll 1$, согласно (2), реализуется в случае потенциальной ямы, параметры U_0, R которой удовлетворяют соотношению

$$\sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}} \approx (n + 1/2)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

$$\left(g(0) = \frac{\kappa_0 R}{\operatorname{tg} \kappa_0 R - \kappa_0 R}, \quad \kappa_0 = \sqrt{2mU_0/\hbar^2} \right).$$

При этом ϵ представляет величину энергии мелкого реального или виртуального уровня, существующего в рассматриваемом поле при $|g(0)| \ll 1$.

13.36. У. Ш. для функции $\chi(r) = r\Psi_0(r)$ ($l=0$) и его решение, удовлетворяющее граничному условию $\chi(0) = 0$, имеют вид

$$\chi'' - \bar{\alpha}\delta(r-R)\chi + k^2\chi = 0 \quad (\bar{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2),$$

$$\Psi_0(r) = \frac{\chi(r)}{r} = \begin{cases} \frac{A}{r} \sin kr, & r < R, \\ \frac{1}{r} (S_0 e^{ikr} - e^{-ikr}), & r > R. \end{cases}$$

Из условия сшивания в. ф. $\chi(r)$ при $r=R$ (см. 2.10) находим

$$S_0 = e^{2i\delta_0} = e^{-2ikR} \frac{\bar{\alpha}R \sin kR + kR \cos kR + ikR \sin kR}{\bar{\alpha}R \sin kR + kR \cos kR - ikR \sin kR}. \quad (1)$$

При $\bar{\alpha}R \gg 1$ и $kR \sim 1$ (точнее, $kR \ll \bar{\alpha}R$) из (1) имеем, вообще говоря, $S_0 \approx e^{-2ikR}$, т. е. $\delta_0 \approx -kR$, что соответствует рассеянию на непроницаемой сфере (см. 13.24, а). Специального рассмотрения требует случай таких энергий частиц, при которых $kR \approx n\pi$, $n = 1, 2, \dots$, так как при этом в выражении (1) нельзя заменять дробный множитель единицей. Представив kR в виде $kR = n\pi + \gamma$, $|\gamma| \ll 1$, знаменатель дроби в формуле (1) легко преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}R \sin kR + kR \cos kR - ikR \sin kR &\approx (-1)^n (\bar{\alpha}R\gamma + n\pi - in\pi\gamma) = \\ &= (-1)^n (\bar{\alpha}R - in\pi) \left(\gamma + \frac{n\pi}{\bar{\alpha}R - in\pi} \right) \approx \\ &\approx (-1)^n (\bar{\alpha}R - in\pi) \left[kR - n\pi + \frac{n\pi}{\bar{\alpha}R} + i \left(\frac{n\pi}{\bar{\alpha}R} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

при этом выражение (1) оказывается равным

$$S_0 \approx e^{-2ikR} \frac{kR - n\pi + \frac{n\pi}{\bar{\alpha}R} - i \left(\frac{n\pi}{\bar{\alpha}R} \right)^2}{kR - n\pi + \frac{n\pi}{\bar{\alpha}R} + i \left(\frac{n\pi}{\bar{\alpha}R} \right)^2}. \quad (2)$$

Умножив числитель и знаменатель формулы (2) на $\frac{\hbar^2}{2mR^2} \left(kR + n\pi - \frac{n\pi}{\bar{\alpha}R} \right) \approx \frac{\hbar^2 n\pi}{mR^2}$, перепишем ее в более удобной

форме:

$$S_0 \equiv e^{2i\delta_0^{(0)}} \frac{E - E_{n,0} - i\Gamma_n/2}{E - E_{n,0} + i\Gamma_n/2} = e^{-2ikR} \frac{E - E_{n,0} - i\Gamma_n/2}{E - E_{n,0} + i\Gamma_n/2}, \quad (3)$$

где

$$E_{n,0} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mR^2} (1 - 2/\bar{\alpha}R), \quad \Gamma_n = \frac{2\hbar^2 n^2 \pi^2}{mR^2} \frac{n\pi}{(\bar{\alpha}R)^2} \ll E_{n,0}.$$

Выражение (3) имеет вид, стандартный для случая резонансного рассеяния на квазидискретном уровне, при этом величина $\delta_0^{(0)} = -kR$ представляет фазу так называемого потенциального рассеяния (с $l=0$), а $E_{n,0}$ и Γ_n определяют положение и ширину квазидискретных уровней. Таким образом:

- 1) фаза потенциального рассеяния совпадает с фазой рассеяния на непроницаемой сфере;
- 2) положение $E_{n,0}$ квазидискретных уровней фактически совпадает с уровнями энергии д. с. в бесконечно глубокой сферической яме радиуса R ;
- 3) ширина уровня, определяющая время жизни квазидискретного состояния, может быть представлена в виде

$$\Gamma_n = \hbar/\tau_n \equiv \hbar DN = \hbar \cdot 4 \left(\frac{n\pi}{\bar{\alpha}R} \right)^2 \cdot \frac{\hbar n\pi}{2mR^2},$$

где D — коэффициент проницаемости δ -функционального барьера для частиц с энергией $E = \hbar^2 n^2 \pi^2 / 2mR^2$ (см. 2.47), а N представляет число ударов частицы о стенку в единицу времени:

$$N = \frac{v}{2R} = \frac{\hbar r \pi}{2mR^2}.$$

Из физических соображений следует ожидать, что аналогичные результаты имеют место и для рассеяния с $l \neq 0$. Поэтому при $kR \ll \bar{\alpha}R$ сечение рассеяния $\sigma(E)$ на δ -функциональной сфере совпадает с сечением рассеяния на непроницаемой сфере такого же радиуса, за исключением узких областей ΔE вблизи квазидискретных уровней. Так как

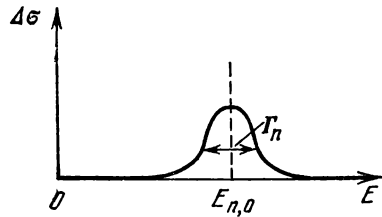


Рис. 39.

Из физических соображений следует ожидать, что аналогичные результаты имеют место и для рассеяния с $l \neq 0$. Поэтому при $kR \ll \bar{\alpha}R$ сечение рассеяния $\sigma(E)$ на δ -функциональной сфере совпадает с сечением рассеяния на непроницаемой сфере такого же радиуса, за исключением узких областей ΔE вблизи квазидискретных уровней. Так как

$$\sigma(E) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(E) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left| \frac{S_l - 1}{2ik} \right|^2$$

и при энергии частицы, близкой к энергии квазидискретного s -уровня, рассеяния частиц с $l=0$ на непроницаемой сфере не происходит ($\delta^{(0)} \approx n\pi$), то разность сечений рассеяния на δ -функциональной и непроницаемой сферах в окрестности квазидискретного s -уровня оказывается равной (рис. 39)

$$\Delta\sigma = \pi R^2 \frac{\Gamma_n^2}{n^2 \pi^2 [(E - E_{n,0})^2 + \Gamma_n^2/4]} > 0.$$

13.37. При выполнении условий $kR \gg 1$, $U_0 \ll E$, $\theta \ll 1$ (U_0 , R — характерные величина и радиус потенциала) в выражении

$$f(k, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l(k)} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (1)$$

можно воспользоваться квазиклассическим выражением для фазовых сдвигов вида

$$\delta_l(k) \approx -\frac{m}{2k\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} U \left(\sqrt{z^2 + \frac{(l+1/2)^2}{k^2}} \right) dz \quad (2)$$

и соотношением

$$P_l(\cos \theta) \approx J_0((l+1/2)\theta), \quad l \gg 1,$$

а также заменить суммирование по l интегрированием, так как в сумме существенно большое число слагаемых с $l \sim kR$, которые при изменении l на единицу мало изменяются. Действительно,

$$J_0[(l+1)\theta] \approx J_0(l\theta),$$

$$\Delta\delta_l \equiv \delta_{l+1} - \delta_l \sim \frac{\partial}{\partial l} \delta_l \sim \frac{m}{k\hbar^2} U_0 \frac{l}{Rk^2} \sim \frac{mU_0}{k^2\hbar^2}, \quad \text{т. е. } |\Delta\delta_l| \ll 1.$$

Учитывая сказанное выше и сделав замену переменной $\rho = M/\rho = \hbar(l+1/2)/\hbar k = (l+1/2)/k$, из выражения (1) получаем более удобное для приложений представление амплитуды рассеяния:

$$f(k, \theta) = ik \int_0^{\infty} \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{im}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{z^2 + \rho^2}) dz \right] \right\} J_0(k\rho\theta) \rho d\rho. \quad (3)$$

Используя известную формулу

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-ix \cos \varphi} d\varphi$$

и положив в ней $x = k\rho\theta$, $x \cos \varphi \equiv q_{\perp}\rho$, $d^2\rho \equiv \bar{\rho} d\rho d\varphi$, легко получить и другое, эквивалентное (3) представление амплитуды рассеяния, приведенное в условии задачи.

13.38. При вычислении полного сечения рассеяния следует учесть, что в условиях применимости приближения эйконала $kR \gg 1$, $U_0 \ll E$ рассеяние частиц происходит в основном под малыми углами $\theta \leq (kR)^{-1}$. Поэтому

$$\sigma(E) = \int |f|^2 d\Omega \approx 2\pi \int_{\theta \leq (kR)^{-1} \ll 1} |f|^2 \theta d\theta \approx 2\pi \int_0^{\infty} |f_{\text{эик}}|^2 \theta d\theta. \quad (1)$$

Верхний предел интегрирования по θ можно положить равным бесконечности, так как в приближении эйконала

$$f_{\text{эик}}(k, \theta) = \int_0^{\infty} C(\rho) J_0(k\rho\theta) \rho d\rho,$$

где

$$C(\rho) = ik \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{im}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{z^2 + \rho^2}) dz \right] \right\},$$

величина амплитуды рассеяния при $\theta \gtrsim 1$ (в этой области углов $f_{\text{эик}}$ можно рассматривать формально как функцию θ , не имеющую физического смысла) быстро убывает с ростом θ из-за быстрых осцилляций множителя $J_0(k\rho\theta)$, и вклад этой области в интеграл по θ пренебрежимо мал.

Записав выражение (1) в виде

$$\sigma(E) = 2\pi \iint C(\rho) C^*(\rho') J_0(\rho k\theta) J_0(k\rho'\theta) \rho \rho' d\rho d\rho' \theta d\theta$$

и выполнив интегрирование по θ с помощью соотношения

$$\int_0^{\infty} J_0(\lambda\theta) J_0(\lambda'\theta) \theta d\theta = \frac{1}{\sqrt{\lambda\lambda'}} \delta(\lambda - \lambda'), \quad \lambda = k\rho,$$

получаем

$$\begin{aligned} \sigma(E) &= \frac{2\pi}{k^2} \int_0^{\infty} \rho |C(\rho)|^2 d\rho = \\ &= 4\pi \int_0^{\infty} \left\{ 1 - \cos \left[\frac{m}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{z^2 + \rho^2}) dz \right] \right\} \rho d\rho. \end{aligned}$$

Это совпадает со значением $4\pi \text{Im} f_{\text{эик}}(k, \theta=0)/k$, что и доказывает оптическую теорему.

13.39. Согласно оптической теореме

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(k, \theta=0) = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - \cos 2\delta_l). \quad (1)$$

При $kR \gg 1$ в этой сумме существенную роль играет большое число слагаемых с $l \sim kR$ (R — радиус потенциала), при этом фазовые сдвиги определяются квазиклассическим выражением

$$\delta_l \approx \int_{r_0}^{\infty} \left[\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E-U) - \hbar^2(l+1/2)^2/r^2} - k \right] dr + \frac{\pi}{2} (l+1/2) - kr_0. \quad (2)$$

При выполнении условия $|U| \ll E$ из выражения (2) путем разложения подынтегральной функции по степеням U получаем

$$\delta_l \approx -\frac{m}{k\hbar^2} \int_{r_0=(l+1/2)/k}^{\infty} \frac{rU(r) dr}{\sqrt{r^2 - (l+1/2)^2/k^2}} = -\frac{m}{2k\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{z^2 + r_0^2}) dz. \quad (3)$$

При этом изменение δ_l при замене l на $(l+1)$ является величиной порядка

$$|\Delta\delta_l| \sim \left| \frac{\partial}{\partial l} \delta_l \right| \sim \frac{m}{k\hbar^2} |U(r_0)| \frac{l}{k^2 R} \sim \frac{m |U(r_0)|}{\hbar^2 k^2} \ll 1,$$

т.е. оно мало, и в соответствующей части суммы (1) можно суммирование заменить интегрированием по переменной $\rho = (l+1/2)/k$.

В случае $|U(r_0)| \gtrsim E$ выражения (2) и (3) имеют, вообще говоря, различные значения, но они обладают одним общим свойством: оба они дают $|\delta_l| \gg 1$ и изменение фазы $|\Delta\delta_l| = |\delta_{l+1} - \delta_l| \gtrsim 1$. Это приводит к тому, что соответствующая часть суммы (1), содержащая $\cos 2\delta_l$, пренебрежимо мала из-за быстрой осцилляции слагаемых независимо от того, какое выражение, (2) или (3), использовать. Следовательно, и в этой области значений l (когда $|U(r_0)| \gtrsim E$) можно заменить суммирование по l интегрированием по ρ , используя значение фазовых сдвигов в виде (3).

Учитывая сказанное выше о замене суммирования по l интегрированием по ρ , легко приходим к выражению для сечения рассеяния быстрых частиц $kR \gg 1$, приведенному в условии задачи.

Внимательный читатель сообразит, что в случае быстрых частиц, даже при условии $|U_0| \gtrsim E$, амплитуда рассеяния все еще имеет эйкональный вид в области достаточно малых углов рассеяния, пока не начинают сказываться осцилляции полиномов Лежандра.

В случае рассеяния быстрых частиц потенциальным барьером (или ямой), приведенным в условии задачи, сечение рассеяния равно

$$\begin{aligned} \sigma &= 4\pi \int_0^R \left[1 - \cos \left(\frac{2mU_0}{k\hbar^2} \sqrt{R^2 - \rho^2} \right) \right] \rho d\rho = \\ &= 2\pi R^2 \left[1 - \frac{2}{\xi^2} (\xi \sin \xi + \cos \xi - 1) \right] \quad \left(\xi = \frac{2mU_0 R}{k\hbar^2} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

(интеграл вычисляется заменой $x = \sqrt{R^2 - \rho^2}$).

При $\xi \ll 1$ из (4) следует результат борновского приближения $\sigma = \pi R^2 \frac{mU_0^2 R^2}{\hbar^2 E} \ll \pi R^2$, а при $\xi \gg 1$ имеем $\sigma(E) \approx 2\pi R^2$ — известный результат для сечения рассеяния быстрых частиц непроницаемой сферой (см. 13.4, ∂ и 13.30).

13.40. В случае степенного потенциала $U \approx \alpha/r^n$ с $n > 2$ радиус его действия R определяется из соотношения $U(R) \sim \hbar^2/mR^2$, т. е. $R \sim \sqrt{m\alpha/\hbar^2}$ при $n = 4$. Приведенное в условии задачи неравенство означает, что частицы можно считать быстрыми, $kR \gg 1$, и для вычисления сечения рассеяния можно воспользоваться результатом предыдущей задачи:

$$\sigma = 4\pi \int_0^\infty \left\{ 1 - \cos \left[\frac{m\alpha}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{dz}{(\rho^2 + z^2)^2} \right] \right\} \rho \, d\rho. \quad (1)$$

Учитывая значение интеграла

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{dz}{(\rho^2 + z^2)^2} = -\frac{\partial}{\partial \rho^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{dz}{\rho^2 + z^2} = -\frac{\partial}{\partial \rho^2} \frac{\pi}{\rho} = \frac{\pi}{2\rho^3},$$

выражение (1) заменой переменной $x = (\pi m\alpha/2k\hbar^2)\rho^{-3}$ и интегрированием по частям легко привести к виду

$$\begin{aligned} \sigma &= -2\pi \left(\frac{\pi m\alpha}{2k\hbar^2} \right)^{2/3} \int_{x=0}^\infty (1 - \cos x) dx x^{-2/3} = \\ &= 2\pi \left(\frac{\pi m\alpha}{2k\hbar^2} \right)^{2/3} \int_0^\infty x^{-2/3} \sin x \, dx. \end{aligned}$$

Подставляя в этом интеграле $\sin x = (e^{ix} - e^{-ix})/2i$ и деформируя контур интегрирования в плоскости комплексной переменной x так, чтобы он проходил по оси чисто мнимых значений x , легко находим

$$\int_0^\infty x^{-2/3} \sin x \, dx = \frac{1}{2} \Gamma(1/3).$$

Соответственно полное сечение рассеяния частиц принимает вид

$$\sigma = \pi \Gamma(1/3) \left(\frac{\pi m\alpha}{2k\hbar^2} \right)^{2/3}.$$

13.41. В приближении эйконала

$$f(k, \mathbf{q}_\perp) = \frac{ik}{2\pi} \iint \left\{ 1 - \exp \left[\frac{-im}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty U(\rho, z) dz \right] \right\} e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} d^2\rho. \quad (1)$$

Из этого выражения с помощью преобразования Фурье получаем

$$\exp \left[\frac{-im}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} U(\mathbf{r}, z) dz \right] = 1 + \frac{i}{2\pi k} \iint f(k, \boldsymbol{\kappa}) e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} d^2\boldsymbol{\kappa}. \quad (2)$$

Подставляя в формулу (1) $U(\mathbf{r}) = U_0(r) + U_0(|\mathbf{r} - \mathbf{a}|)$ и переходя в получающемся выражении к одноцентровым амплитудам рассеяния согласно (2) с $U \equiv U_0$, легко находим искомое соотношение:

$$f(k, \mathbf{q}_{\perp}) = f_0(k, \mathbf{q}_{\perp}) + f_0(k, \mathbf{q}_{\perp}) e^{-i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{a}_{\perp}} + \\ + \frac{i}{2\pi k} e^{-\frac{i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{a}_{\perp}}{2}} \iint f_0\left(k, \boldsymbol{\kappa}_{\perp} - \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2}\right) f_0\left(k, -\boldsymbol{\kappa}_{\perp} + \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2}\right) e^{i\boldsymbol{\kappa}_{\perp} \cdot \mathbf{a}_{\perp}} d^2\boldsymbol{\kappa}_{\perp},$$

где \mathbf{a}_{\perp} — составляющая вектора \mathbf{a} , перпендикулярная направлению импульса падающих частиц \mathbf{n}_0 , т. е. $\mathbf{a} = a_{\parallel} \mathbf{n}_0 + \mathbf{a}_{\perp}$ (f не зависит от величины a_{\parallel} , однако должно быть выполнено условие $|a_{\parallel}| \ll kR^2$, где R — радиус действия силового центра $U_0(r)$, для применимости эйконального приближения).

13.42. Амплитуда рассеянной волны выражается через точную в. ф. так же, как и в случае рассеяния бесспиновых частиц (см. 13.1):

$$F(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{U} \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)} dV \quad (1)$$

(мы написали F вместо f , чтобы подчеркнуть то обстоятельство, что теперь F , как и $\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}$, является двухкомпонентной величиной).

Подставляя в (1) невозмущенную в. ф.

$$\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)} \approx \Psi_{\mathbf{k}_0}^{(0)} = e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} \chi, \quad (2)$$

где χ — спиновая в. ф. (двухкомпонентный спинор), описывающая спиновое состояние падающей (до рассеяния) частицы с $s = 1/2$ (в (1) и (2), как обычно, m , \mathbf{k} , \mathbf{k}_0 — приведенная масса и соответствующие волновые векторы относительного движения), находим

$$F = \hat{f} \chi,$$

где \hat{f} — амплитуда рассеяния, являющаяся оператором (матрицей) в спиновом пространстве, — имеет вид (в борновском приближении)

$$\hat{f} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left\{ U_0(r) + U_1(r) \hat{\sigma} \hat{1} \right\} e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} dV. \quad (3)$$

Выражение (3) легко преобразовать к виду ($\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$)

$$\hat{f} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}_0(q) + i \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{q} \frac{\partial \tilde{U}_1(q)}{\partial q} \hat{\sigma} [\mathbf{k}_0 \mathbf{k}], \quad (4)$$

где $\tilde{U}_{0,1}(q) = \int e^{-iqr} U_{0,1}(r) dV$, если воспользоваться соотношениями

$$\begin{aligned} -i \int e^{-ikr} U_1(r) [\mathbf{r} \nabla_{\mathbf{r}}] e^{ik_0 r} dV &\equiv \int e^{-ikr + ik_0 r} U_1(r) [\mathbf{r} \mathbf{k}_0] dV = \\ &= i \left[\left(\frac{\partial}{\partial q} \int e^{-iqr} U_1(r) dV \right) \mathbf{k}_0 \right] = i \left[\frac{\partial \tilde{U}_1(q)}{\partial q} \mathbf{k}_0 \right], \\ \frac{\partial U_1(q)}{\partial q} &= \frac{\partial U_1(q)}{\partial q} \frac{q}{q}, \quad [\mathbf{q} \mathbf{k}_0] = [\mathbf{k} \mathbf{k}_0]. \end{aligned}$$

13.43. В исходной системе координат имеется только электростатическое поле $\mathcal{E} = Ze\mathbf{r}/r^3$ и нейтрон имеет скорость $\mathbf{v} = \mathbf{p}/M$. В системе координат, связанной с нейтроном, появляется магнитное поле $\mathcal{H} \approx \frac{1}{c} [\mathcal{E} \mathbf{v}]$ (мы считаем $v \ll c$), и энергия взаимодействия оказывается равной

$$U = -\mu \mathcal{H} = -\frac{Ze}{cr^3} \mu [\mathbf{r} \mathbf{v}] = -\frac{Ze}{cMr^3} (\mu \mathbf{L}). \quad (1)$$

Квантовомеханическое обобщение формулы (1) определяет вид эрмитова оператора взаимодействия нейтрона с кулоновским полем:

$$\hat{U} = \beta \frac{Ze^2 \hbar^2}{2M^2 c^2} \frac{1}{r^3} (\hat{\sigma} \hat{\mathbf{l}}) \quad (2)$$

(мы учли, что оператор магнитного момента нейтрона есть $\hat{\mu} = \mu \hat{\sigma} \equiv -\frac{\beta e \hbar}{2Mc} \hat{\sigma}$, где экспериментальное значение $\beta \approx 1,91$).

Используя общее выражение для амплитуды рассеяния, полученное в предыдущей задаче (формула (3)), и значение интеграла

$$\begin{aligned} \int \frac{\mathbf{r}}{r^3} e^{-iqr} dV &= -\int e^{-iqr} \nabla \frac{1}{r} dV = \int \frac{1}{r} \nabla e^{-iqr} dV = \\ &= -i\mathbf{q} \int \frac{1}{r} e^{-iqr} dV = -\frac{4\pi i \mathbf{q}}{q^2}, \end{aligned}$$

легко находим амплитуду рассеяния:

$$F = f \chi = -i \frac{\beta Ze^2}{Mc^2 q^2} \hat{\sigma} [\mathbf{k}_0 \mathbf{k}] \chi = -i \frac{\beta Ze^2}{2Mc^2} \text{ctg} \frac{\theta}{2} (\hat{\sigma} \mathbf{n}) \chi \quad (3)$$

(мы ввели единичный вектор $\mathbf{n} = \frac{[\mathbf{k}_0 \mathbf{k}]}{|[\mathbf{k}_0 \mathbf{k}]|}$ нормали к плоскости рассеяния).

Дифференциальное сечение рассеяния, просуммированное по спиновым состояниям рассеянного нейтрона, равно скалярному произведению $F^+ F$ (в спиновом пространстве). Так как $[(\hat{\sigma} \mathbf{n}) \chi]^+ = \chi^+ (\hat{\sigma} \mathbf{n})$ и $(\hat{\sigma} \mathbf{n})^2 = 1$, получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = F^+ F = \left(\frac{\beta Ze^2}{2Mc^2} \right)^2 \text{ctg}^2 \frac{\theta}{2} \chi^+ \chi = \left(\frac{\beta Ze^2}{2Mc^2} \right)^2 \text{ctg}^2 \frac{\theta}{2}. \quad (4)$$

Мы не будем останавливаться на вопросе об условиях применимости выражения (4) к случаю рассеяния нейтрона на кулоновском поле ядра. Укажем лишь, что при выяснении этого вопроса следует учитывать конечность размеров ядра, его экранировку атомными электронами, а также наличие рассеяния нейтронов ядром за счет ядерных сил.

13.44. Как известно [3], если записать амплитуду рассеяния в виде

$$\hat{f} = A(k, \theta) + B(k, \theta) \hat{\sigma} \mathbf{n} \quad \left(\mathbf{n} = \frac{[\mathbf{k}_0 \mathbf{k}]}{|\mathbf{k}_0 \mathbf{k}|} \right), \quad (1)$$

то дифференциальное сечение рассеяния неполяризованных частиц, просуммированное по спиновым состояниям рассеянных частиц, имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A|^2 + |B|^2. \quad (2)$$

В борновском приближении (см. 13.42)

$$A = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}_0(q), \quad B = \frac{im}{2\pi\hbar^2} \frac{\partial \tilde{U}_1(q)}{\partial q} k \cos \frac{\theta}{2}. \quad (3)$$

Согласно (2) и (3) полное сечение рассеяния равно ($d\Omega = \frac{\pi}{k^2} dq^2$)

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{m^2}{4\pi\hbar^4} \int_0^{q_0^2} \left\{ |\tilde{U}_0(q)|^2 + \left(k^2 - \frac{q^2}{4} \right) \left| \frac{\partial \tilde{U}_1}{\partial q} \right|^2 \right\} dq^2 \quad (q_0^2 = 4k^2). \quad (4)$$

При больших энергиях $kR_{0,1} \gg 1$ ($R_{0,1}$ — характерные расстояния, на которых отличны от нуля функции $U_{0,1}(r)$; при этом $\tilde{U}_{0,1}(q)$ существенно отличны от нуля лишь при $qR_{0,1} \lesssim 1$), из (4) следует

$$\sigma(E) \approx C_0/E + C_1, \quad (5)$$

где

$$C_0 = \frac{m}{8\pi\hbar^2} \int_0^\infty |\tilde{U}_0(q)|^2 dq^2, \quad C_1 = \frac{m^2}{4\pi\hbar^4} \int_0^\infty \left| \frac{\partial \tilde{U}_1(q)}{\partial q} \right|^2 dq^2$$

(мы оставили в формуле (5) оба слагаемых C_0/E и C_1 , так как при больших, но конечных значениях E они могут быть одного порядка).

13.45. Так как $\hat{U}^+ = [U_0(r) + U_1(r)(\hat{\sigma}\hat{1})]^+ = U_0^* + U_1^*(\hat{\sigma}\hat{1})$, то эрмитовость гамильтониана $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}$ требует $U_{0,1} = U_{0,1}^*$.

Как известно [3], поляризация рассеянных частиц равна (если до рассеяния они были не поляризованы, $\mathbf{P} = 0$)

$$\mathbf{P}' = \frac{2 \operatorname{Re}(AB^*)}{|A|^2 + |B|^2} \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \frac{[\mathbf{k}_0 \mathbf{k}]}{|[\mathbf{k}_0 \mathbf{k}]|} \quad (1)$$

(представление амплитуды рассеяния f через функции A, B и выражение этих функций через фурье-компоненты $\hat{U}_{0,1}(q)$ приведены в решении предыдущей задачи).

Фурье-компоненты вещественных функций $U_{0,1}(r)$ также вещественны. Поэтому A — вещественная функция, а B — чисто мнимая (в борновском приближении) и согласно (1) $\mathbf{P}' = 0$.

13.46. Как известно [3], поляризация рассеянных частиц равна (\mathbf{P} — вектор поляризации частиц до рассеяния)

$$\mathbf{P}' = \frac{(|A|^2 - |B|^2) \mathbf{P} + 2|B|^2 \mathbf{n}(\mathbf{nP}) + 2 \operatorname{Im}(AB^*)[\mathbf{nP}] + 2\mathbf{n} \operatorname{Re}(AB^*)}{|A|^2 + |B|^2 + 2 \operatorname{Re}(AB^*) \mathbf{nP}}. \quad (1)$$

В борновском приближении функция A — действительная, а B — чисто мнимая (см. предыдущую задачу). Поэтому (1) принимает вид

$$\mathbf{P}' = \frac{(A^2 + B^2) \mathbf{P} - 2B^2 \mathbf{n}(\mathbf{nP}) + 2iAB[\mathbf{nP}]}{A^2 - B^2} \quad (B^2 < 0)$$

и, как легко убедиться, $(\mathbf{P}')^2 = \mathbf{P}^2$. Поворот вектора поляризации происходит вокруг нормали \mathbf{n} к плоскости рассеяния.

13.47. В случае медленных частиц существенно рассеяние лишь в s -состоянии ($l = 0$). Поэтому амплитуда рассеяния не зависит от угла рассеяния и имеет структуру вида

$$\hat{f} = A + B(\hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_p). \quad (1)$$

Выражение (1) удобно представить в виде

$$\hat{f} = f_s \frac{1 - \hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_p}{4} + f_t \frac{3 + \hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_p}{4}, \quad (2)$$

где $f_{s,t}$ — амплитуды рассеяния в синглетном $S = 0$ и триплетном $S = 1$ состояниях (по поводу с. з. оператора $\hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_p$ см. 5.18).

Согласно условию задачи рассеяние имеет резонансный характер в s -состояниях, и поэтому, как обычно,

$$f_s = \frac{1}{\xi - \kappa_1 - ik}, \quad f_t = \frac{1}{-\kappa_2 - ik},$$

где

$$\kappa_1 = \sqrt{\frac{2m|e_d|}{\hbar^2}} > 0, \quad \kappa_2 = -\sqrt{\frac{2m|e_{\text{вирт}}|}{\hbar^2}} < 0,$$

$m = m_N/2$ — приведенная масса системы (напомним, что процесс рассеяния рассматривается, как обычно, в с. ц. и.).

13.48. Согласно известной общей формуле

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{2mv^2}\right)^2 [Z - F(q)]^2 \frac{d\Omega}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (1)$$

вычисляя в случае атома водорода ($Z = 1$) атомный форм-фактор в основном состоянии

$$F(q) = \int n(r) e^{-iqr} dV = \frac{1}{\pi a_0^3} \int e^{-2r/a_0 - iqr} dV = \frac{16}{(4 + q^2 a_0^2)^2} \quad (2)$$

($a_0 = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус), находим

$$d\sigma = 4a_0^2 \frac{(8 + q^2 a_0^2)^2}{(4 + q^2 a_0^2)^4} d\Omega \quad (q = 2k \sin(\theta/2)). \quad (3)$$

Так как $d\Omega = \frac{\pi}{k^2} dq^2$, то полное сечение упругого рассеяния оказывается равным

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \int_0^{4k^2} \frac{d\sigma}{d\Omega} dq^2 = \frac{4\pi}{k^2} \left[\frac{7}{12} - \frac{7 + 9k^2 a_0^2 + 3k^4 a_0^4}{12(1 + k^2 a_0^2)^3} \right] \approx \frac{7\pi a_0^2}{3(ka_0)^2} \quad (4)$$

(в формуле (4) мы учли, что условие применимости использованного здесь борновского приближения имеет вид $ka_0 \gg 1$),

13.49. Задача решается аналогично предыдущей. В приближении задачи 11.7 плотность электронов и форм-фактор основного состояния атома гелия равны

$$n(r) = \frac{2}{\pi a^3} e^{-2r/a} \quad (a = a_0/Z_{эфф} = 16a_0/27),$$

$$F(q) = \int n(r) e^{-iqr} dV = \frac{2}{\pi a^3} \int e^{-2r/a - iqr} dV = \frac{32}{(4 + q^2 a^2)^2},$$

и соответственно дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния электронов атомом гелия принимают вид ($ka_0 \gg 1$)

$$d\sigma = \frac{16a^4}{a_0^2} \frac{(8 + q^2 a^2)^2}{(4 + q^2 a^2)^4} d\Omega, \quad \sigma = \frac{28\pi a^2}{3(ka_0)^2}$$

(полное сечение отличается от сечения рассеяния атомом водорода на множитель $4(16/27)^2 \approx 1,40$).

13.50. Используя общую формулу [3]

$$d\sigma_n = 4\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \frac{dq^2}{q^4} \left| \int \sum_a e^{-iqr} \Psi_n^* \Psi_0 d\tau \right|^2,$$

найдем сначала дифференциальное сечение процесса. Для этого требуется вычислить матричный элемент величины e^{-iqr} между в. ф. $1s$ - (Ψ_0) и $2s$ - (Ψ_n) состояний:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}, \quad \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} e^{-r/2} \left(1 - \frac{r}{2} \right)$$

(здесь и ниже используем атомные единицы). После выполнения интегрирования по углам (в сферической системе координат)

нат с полярной осью вдоль вектора \mathbf{q}) имеем

$$\langle n | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | 0 \rangle = \frac{2\pi}{iq} \int_0^\infty \Psi_0(r) \Psi_n(r) (e^{iqr} - e^{-iqr}) r dr,$$

и окончательное выражение для матричного элемента

$$\langle n | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | 0 \rangle = \frac{4\sqrt{2} q^2}{(9/4 + q^2)^3}$$

легко получить, воспользовавшись формулой (k — целое число)

$$\int_0^\infty e^{-ar} r^k dr = k! / a^{k+1} \quad (\text{Re } a > 0).$$

Таким образом,

$$d\sigma_{2s} = \frac{4\pi}{v^2} \frac{32dq^2}{(9/4 + q^2)^3}, \quad (1)$$

и, интегрируя это выражение, находим полное сечение возбуждения $2s$ -состояния атома водорода:

$$\sigma(1s \rightarrow 2s) = \int d\sigma_{2s} = \frac{\pi}{5v^2} \frac{2^{17}}{3^{10}}$$

(нижний предел интегрирования по q^2 , равный $q_{\text{min}}^2 \approx 9/64v^2 \ll 1$, можно заменить нулем, а верхний $q_{\text{max}}^2 \approx 4v^2 \gg 1$ — бесконечностью).

Отметим, что рассчитанное сечение примерно в 6 раз меньше сечения упругого рассеяния (см. 13.48).

13.51. Легко сообразить, что общие формулы теории неупругих столкновений электронов с атомами (в борновском приближении) непосредственно переносятся на случай столкновений электронов с ядрами: следует только заменить суммирование по электронам атома суммированием по протонам, входящим в состав ядра (взаимодействие электронов с протонами отличается от электрон-электронного лишь знаком). Поэтому исходная формула для дифференциального сечения процесса имеет вид

$$d\sigma = \left(\frac{e^2 m_e}{\hbar^2} \right)^2 \frac{4p'}{pq^4} \left| \int \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathbf{p}}} \Psi_n^* \Psi_0 d\tau \right|^2 d\Omega, \quad (1)$$

где Ψ_0, Ψ_n — в. ф. начального и конечного состояний ядра, \mathbf{p}, \mathbf{p}' — импульсы электронов до и после столкновения.

В формуле (1) $r_{\mathbf{p}} \sim R_{\text{яд}} \sim 10^{-13}$ см, поэтому для нерелятивистских электронов $qr_{\mathbf{p}} \leq kR_{\text{яд}} \ll 1$ и экспоненту можно разложить в ряд:

$$\sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathbf{p}}} \approx \sum_{\mathbf{p}} \left(1 - i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathbf{p}} - \frac{(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathbf{p}})^2}{2} + \dots \right). \quad (2)$$

Для первых двух членов разложения (2) матричный элемент в формуле (1) обращается в нуль (напомним, что оба рассматриваемых состояния ядра по условию имеют момент $J = 0$). Поэтому

$$\begin{aligned} \langle n | \sum_p \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_p) | 0 \rangle &\approx -\frac{1}{2} \sum_p \langle n | (\mathbf{q}\mathbf{r}_p)^2 | 0 \rangle \equiv \\ &\equiv -\frac{1}{2} q_i q_k \langle n | \sum_p x_{pi} x_{pk} | 0 \rangle = -\frac{1}{6} q_i q_k Q_0 \delta_{ik} = -\frac{q^2 Q_0}{6}, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$Q_0 = \langle n | \sum_p r_p^2 | 0 \rangle \equiv \int \Psi_n^* \sum_p r_p^2 \Psi_0 d\tau.$$

Таким образом, согласно (1) и (3) имеем

$$d\sigma = \frac{1}{9} \left(\frac{e^2 m_e}{\hbar^2} \right)^2 \frac{p'}{p} |Q_0|^2 d\Omega, \quad \sigma = \frac{4\pi}{9} \left(\frac{e^2 m_e}{\hbar^2} \right)^2 \frac{p'}{p} |Q_0|^2.$$

Отметим, что величина Q_0 , входящая в сечение процесса, определяет также вероятность конверсии при соответствующем $E0$ -переходе ядра (см. 11.83).

13.52. Легко сообразить (по аналогии с рассеянием быстрых электронов атомами), что исходная формула для расчета сечения рассеяния в рассматриваемой модельной задаче имеет вид

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p'}{p} \left| \iint U e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Psi_n^* \Psi_0 dV d\mathbf{o}_n \right|^2 d\Omega, \quad (1)$$

где m — масса заряженной частицы (считаем, для простоты, $m \ll M$, M — масса ротатора); p , p' — ее импульсы до и после столкновения; Ψ_0 , Ψ_n — в. ф. начального и конечного состояний ротатора; $d\mathbf{o}_n$ — элемент телесного угла направления оси \mathbf{n} ротатора; $U = -e(\mathbf{d}\mathbf{r})/r^3 = -ed(\mathbf{n}\mathbf{r})/r^3$ — энергия взаимодействия ротатора (электрического диполя) с заряженной частицей, $-e$ — ее заряд.

Учитывая значение интеграла (см. 13.43)

$$\int \frac{\mathbf{r}}{r^3} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV = -4\pi i \frac{\mathbf{q}}{q^2},$$

перепишем выражение (1) в виде

$$d\sigma_n = \frac{4m^2 e^2 d^2}{\hbar^4 q^4} \frac{p'}{p} \left| \int \Psi_n^*(\mathbf{n}\mathbf{q}) \Psi_0 d\mathbf{o}_n \right|^2 d\Omega. \quad (2)$$

По условию задачи $\Psi_0 = Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$. Выбрав в матричном элементе $\langle n | \mathbf{q}\mathbf{n} | 0 \rangle$ направление оси квантования (оси \mathbf{z}) вдоль вектора \mathbf{q} , так что $\mathbf{q}\mathbf{n} = q \cos \theta$, и учитывая известное соотношение $\cos \theta Y_{00} = -\frac{i}{\sqrt{3}} Y_{10}$, находим

$$\langle n | \mathbf{q}\mathbf{n} | 0 \rangle = -\frac{iq}{\sqrt{3}} \int \Psi_n^* Y_{10} d\mathbf{o}_n.$$

Ввиду ортогональности с. ф. ротатора Y_{lm} это выражение от-
лично от нуля лишь в том случае, если квантовые числа ко-
нечного состояния ротатора (после столкновения) равны: $l = 1$,
 $m = 0$, т. е. $\Psi_n = Y_{10}$; при этом $\langle l = 1, m = 0 | \mathbf{q} \mathbf{n} | 0 \rangle = -iq/\sqrt{3}$,
а остальные матричные элементы равны нулю. Таким образом,
в первом порядке теории возмущений при столкновении проис-
ходят лишь процессы неупругого рассеяния, сопровождающиеся
переходом ротатора в первое возбужденное состояние. При
этом выражение (2) принимает вид

$$d\sigma(0 \rightarrow 1) = \frac{4m^2 e^2 d^2}{3\hbar^4 q^2} \frac{p'}{p} d\Omega. \quad (3)$$

Так как $q^2 = (p^2 + (p')^2 - 2pp' \cos \theta)/\hbar^2$, то согласно (3) имеем
($p' d\Omega = \pi \hbar^2 p^{-1} dq^2$)

$$d\sigma(0 \rightarrow 1) = \frac{4\pi m^2 e^2 d^2}{3\hbar^2 p^2} \frac{dq^2}{q^2}, \quad \sigma(0 \rightarrow 1) = \frac{8\pi m^2 e^2 d^2}{3\hbar^2 p^2} \ln \frac{p + p'}{p - p'}$$

(значение p' определяется законом сохранения энергии $p'^2/2m =$
 $= p^2/2m - \hbar^2/l$).

13.53. При большом расстоянии между частицей и атомом
($r \gg a_0$ — боровского радиуса) энергия их взаимодействия равна

$$U(r) = \frac{1}{2} Ze \frac{d\mathbf{r}}{r^3} = -\frac{\beta (Ze)^2}{2r^4}, \quad (1)$$

где Ze — заряд частицы, β — поляризуемость атома. Формула (1)
представляет энергию взаимодействия заряда частицы с инду-
цированным дипольным моментом атома $\mathbf{d} = \beta \mathbf{E} = -\beta Ze \mathbf{r}/r^3$,
и ее применимость определяется лишь требованием малости
относительной скорости частицы и атома по сравнению со ско-
ростями атомных электронов (в противном случае существен-
ными становятся динамические процессы возбуждения атома и
понятие потенциала взаимодействия теряет строгий смысл).

Считая в то же время частицы не слишком медленными (так
что в процессе столкновения существенны все еще большие зна-
чения момента $l \gg 1$, см. ниже), воспользуемся квазиклассиче-
ским выражением для полного сечения рассеяния (см. 13.39)

$$\sigma = 4\pi \int_0^\infty \left\{ 1 - \cos \left[\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^\infty U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz \right] \right\} \rho d\rho. \quad (2)$$

Легко сообразить, что в формуле (2) вместо истинного зна-
чения $U(r)$ при всех значениях r можно воспользоваться выра-
жением (1). Действительно, хотя при $r \lesssim a_0$ выражение (1)
строго не применимо, оно дает все же правильный порядок ве-
личины $U \sim e^2/a_0$ (напомним, что $\beta \sim a_0^3$). При этом в области
 $\rho \lesssim a_0$ аргумент косинуса в формуле (2) велик (его величина
имеет порядок $e^2/\hbar v \sim v_{ат}/v \gg 1$, так как $v_{ат} \sim e^2/\hbar$) и соответ-

ственно величина интеграла

$$\int_0^{r \leq a_0} \cos \left[\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz \right] \rho d\rho$$

пренебрежимо мала из-за быстрой осцилляции подынтегральной функции независимо от того, какое выражение для $U(r)$ использовано: неизвестное правильное или неправильное (1).

Вычисление интегралов в формуле (2) при $U = -\frac{\beta (Ze)^2}{2r^4}$ было проведено в 13.40. Используя результат этой задачи, имеем

$$\sigma = \pi \Gamma(1/3) \left(\frac{\pi \beta Z^2 e^2}{4 \hbar v} \right)^{2/3}. \quad (3)$$

Из (3) следует, что существенные в процессе рассеяния расстояния имеют величину

$$\rho_0 \sim \sqrt{\sigma} \sim a_0 \left(\frac{v_{ат}}{v} \right)^{1/3} \gg a_0 \quad (Z \sim 1, \beta \sim a_0^3), \quad (4)$$

и условие применимости формулы (2), требующее выполнения неравенства $l \gg 1$, приводит к следующему ограничению (M — масса рассеиваемой частицы):

$$l \sim \frac{M v \rho_0}{\hbar} \sim \frac{M}{m_e} \left(\frac{v}{v_{ат}} \right)^{2/3} \gg 1, \text{ т. е. } \frac{v}{v_{ат}} \gg \left(\frac{m_e}{M} \right)^{3/2}$$

(отметим, что оценку (4) можно получить и непосредственно из формулы (2), учтя, что аргумент косинуса при $\rho \sim \rho_0$ имеет величину порядка единицы).

Таким образом, полученный результат (3) для сечения рассеяния справедлив при скоростях частицы, удовлетворяющих условиям

$$\left(\frac{m_e}{M} \right)^{3/2} v_{ат} \ll v \ll v_{ат}, \quad (5)$$

так что, например, для легких частиц (электронов) формула (3) неприменима.

13.54. При рассеянии медленных частиц ($kR \ll 1$) доминирующую роль играет рассеяние в s -состоянии. При этом

$$f \approx f_0 = \frac{1}{2ik} (S_0 - 1) \equiv \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1) \approx \frac{\delta_0(k)}{k}. \quad (1)$$

В условиях рассматриваемой задачи применимо борновское приближение. Поэтому (напомним, что $qr \leq 2kR \ll 1$)

$$f \approx -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int U(r) dV = -\frac{2mR^3}{3\hbar^2} (U_0 - iU_1) \quad (2)$$

и сечение упругого рассеяния равно

$$\sigma_{упр} = 4\pi |f|^2 = \frac{16\pi m^2 R^6}{9\hbar^4} (U_0^2 + U_1^2).$$

Из сравнения выражений (1) и (2) находим

$$\operatorname{Im} \delta_0(k) = \frac{2mR^3 U_1}{3\hbar^2} k.$$

Эта величина определяет сечение неупругого рассеяния медленных частиц

$$\sigma_{\text{неупр}} \approx \frac{\pi}{k^2} (1 - |S_0|^2) = \frac{\pi}{k^2} (1 - e^{-4\operatorname{Im} \delta_0}) \approx \frac{4\pi \operatorname{Im} \delta_0}{k^2} = \frac{8\pi m R^3 U_1}{3\hbar^2}$$

в согласии с известным «законом $1/v$ ».

13.55. В соответствии с условием задачи в выражении для амплитуды упругого рассеяния

$$f = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta)$$

следует считать, что фазы рассеяния обладают свойством

$$\delta_l = \begin{cases} i\infty, & l < l_0 \approx kR \gg 1, \\ 0, & l > l_0, \end{cases} \quad (1)$$

и соответственно

$$S_l = e^{2i\delta_l} = \begin{cases} 0, & l < l_0, \\ 1, & l > l_0. \end{cases} \quad (2)$$

Приведенное значение фазовых сдвигов соответствует следующей физической картине (движение частиц является квазиклассическим, так как $kR \gg 1$): при прицельных параметрах частиц $\rho = l/k < R$ они «поглощаются» сферой, а при $\rho > R$ движутся свободно. При этом упругое рассеяние частиц является проявлением их волновых свойств, по своей физической природе аналогично дифракции Фраунгофера (см. [5]), и описывается амплитудой

$$f_{\text{диф}} = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) P_l(\cos \theta). \quad (3)$$

Воспользовавшись оптической теоремой, находим

$$\sigma_{\text{полн}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f_{\text{диф}}(\theta=0) = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) \approx 2\pi R^2. \quad (4)$$

Сечение неупругого рассеяния (сечение поглощения) равно

$$\sigma_{\text{неупр}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - |S_l|^2) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) \approx \pi R^2. \quad (5)$$

Сечение упругого рассеяния

$$\sigma_{\text{упр}} = \sigma_{\text{полн}} - \sigma_{\text{неупр}} \approx \pi R^2 \quad (6)$$

(см. также следующую задачу).

13.56. Расчет амплитуды рассеяния, определяемой формулой (3) предыдущей задачи, был проведен в решении задачи 13.31; там же обсуждаются основные особенности дифракционного рассеяния. В частности,

$$\sigma_{\text{упр}} \equiv \sigma_{\text{диф}} = \int |f_{\text{диф}}|^2 d\Omega \approx \pi R^2$$

в согласии с результатом (6) предыдущей задачи.

13.57. Скорости электрона и протона в основном состоянии атома водорода порядка $10^{-2}c$ и $10^{-5}c$ соответственно (c — скорость света). При относительной скорости нейтрона и атома водорода $v_0 \gg 10^{-5}c$ можно пренебречь движением протона в атоме водорода (это соответствует энергии нейтрона $\varepsilon_n \gg \gg 10^{-2}$ эВ). Время, в течение которого взаимодействуют нейтрон и протон, порядка $\tau_{\text{вз}} \sim R_{\text{яд}}/v_0 \sim 10^{-13}$ см/ $v_0 \ll 10^{-18}$ с (если $v_0 \gg 10^{-5}c$). Это время много меньше характерного атомного времени $\tau_{\text{ат}} \sim R_{\text{ат}}/v_e \sim 10^{-17}$ с, и поэтому состояние электрона за время столкновения нейтрона и протона не изменяется. Можно пренебречь также смещением протона за время столкновения, так как $l_{\text{см}} \sim v_0 \tau_{\text{вз}} \sim R_{\text{яд}} \ll R_{\text{ат}}$.

Исходя из указанных оценок, легко сообразить, что амплитуда упругого рассеяния нейтрона на протоне $f(E, q)$ связана с амплитудой $\tilde{f}(E, q)$ упругого рассеяния нейтрона на атоме водорода соотношением

$$\tilde{f}(E, q) = f(E, q)a(q), \quad (1)$$

где $a(q)$ — амплитуда вероятности того, что атом водорода останется в основном состоянии при внезапном изменении скорости ядра — протона от значения $v = 0$ до $v = \hbar q/M$ ($\hbar q$ — переданный при столкновении импульс, M — масса протона; сравнить с 11.77 и 11.78). Воспользовавшись результатом задачи 11.78, имеем

$$a(q) = \int |\Psi_0(r)|^2 \exp\left(-\frac{im_e \mathbf{v} \mathbf{r}}{\hbar}\right) dV = \left(1 + \frac{q^2 m_e^2 a_0^2}{4M^2}\right)^{-2},$$

откуда и следует искомое соотношение между дифференциальными сечениями:

$$\frac{d\sigma_{\text{нн}}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{\text{пр}}}{d\Omega} \left(1 + \frac{q^2 m_e^2 a_0^2}{4M^2}\right)^{-4}.$$

Так как $a(0) = 1$, то, воспользовавшись оптической теоремой и соотношением (1), заключаем, что полные сечения рассеяния нейтрона на протоне и на атоме водорода одинаковы.

13.58. Вероятность аннигиляции пары в единицу времени в основном состоянии позитрония определяется стандартным выражением

$$dw_{\text{анн}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int \Psi_f^* \hat{V} \Psi_0(r) d\tau \right|^2 d\rho_f, \quad (1)$$

где \hat{V} — оператор возмущения, вызывающего аннигиляцию пары; Ψ_0 — в. ф. основного состояния позитрония, равная

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad a = \frac{2\hbar^2}{e^2 m} \quad (2)$$

(приведенная масса системы «электрон + позитрон» равна $m/2$); индекс f характеризует возможные конечные состояния системы фотонов, образующихся при аннигиляции; $d\rho_f$ — дифференциальная плотность конечных состояний, причем все конечные состояния фотонов имеют энергию, равную $E \approx 2mc^2$ (с точностью до энергии связи позитрония, много меньшей mc^2).

Аналогичное выражение для вероятности аннигиляции при столкновении свободных электрона и позитрона имеет вид

$$d\omega_{\text{анн}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int \Psi_f^* \hat{V} \Psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) d\tau \right|^2 d\rho_f, \quad (3)$$

где $\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)}$ — в. ф. свободного относительного движения пары с волновым вектором \mathbf{k} .

В пренебрежении кинетической энергией пары по сравнению с величиной $2mc^2$ энергия фотонов в конечном состоянии равна $E = 2mc^2$. Поэтому конечные состояния фотонов, возникающих при аннигиляции позитрония и свободной пары, одинаковые.

Как известно [3], при нормировке в. ф. $\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)}$ на единичную плотность потока:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

выражение (3) представляет дифференциальное сечение процесса, т. е.

$$d\sigma_{\text{анн}} = \frac{2\pi}{\hbar v} \left| \int \Psi_f^* \hat{V} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\tau \right|^2 d\rho_f. \quad (4)$$

Интегрирование выражений (1), (4) дает полную вероятность распада позитрония и полное сечение аннигиляции пары соответственно. Учитывая малость радиуса взаимодействия, ответственного за аннигиляцию, в этих выражениях можно положить $r = 0$ *) и получить искомое соотношение

$$W_{\text{поз}} = \int d\omega_{\text{поз}} = \frac{1}{\pi a^3} (v\sigma_{\text{анн}}) \quad (5)$$

или

$$\sigma_{\text{анн}} = \pi a^3 W_{\text{поз}}/v \quad (6)$$

в согласии с «законом $1/v$ ».

*) Более точно, положить $r = 0$ в показателе экспоненты в (4) можно при условии $kR_{\text{анн}} \ll 1$ ($R_{\text{анн}}$ — радиус взаимодействия, ответственного за аннигиляцию); с другой стороны, пренебречь кулоновским взаимодействием при столкновении можно лишь при условии $v \gg e^2/\hbar$, так что область применимости (5), (6) ограничена условием $e^2/\hbar \ll v \ll \hbar/mR_{\text{анн}}$.

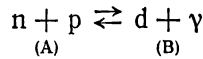
При применениях формул (5), (6) следует иметь в виду, что значение сечения аннигиляции (и вероятности распада позитрония) зависит от величины суммарного спина системы «электрон + позитрон» (см., например, [7]).

13.59. Как известно [3], согласно принципу детального равновесия между сечениями двух взаимно обратных реакций $A \rightleftharpoons B$ существует соотношение вида *)

$$\frac{\bar{\sigma}_{A \rightarrow B}}{\bar{\sigma}_{B \rightarrow A}} = \frac{g_B p_B^2}{g_A p_A^2}. \quad (1)$$

Здесь $\bar{\sigma}$ — полные сечения соответствующих реакций $A \rightarrow B$ и $B \rightarrow A$, усредненные по направлениям спинов частиц в начальном и просуммированные по направлениям спинов частиц в конечном состояниях; g_A, g_B — спиновые статистические веса; p_A, p_B — импульсы относительного движения в состояниях A и B соответственно, взятые при одной и той же полной энергии в системе центра инерции.

В рассматриваемом случае



имеем $\bar{\sigma}_{A \rightarrow B} \equiv \sigma_{\text{зхв}}$ (сечение захвата), $\bar{\sigma}_{B \rightarrow A} \equiv \sigma_{\text{ф.-р}}$ (сечение фоторасщепления). Так как спиновый (поляризационный) статистический вес для частицы со спином s равен $g_s = (2s + 1)$ (однако в силу специфических свойств фотона, имеющего массу покоя $m_\gamma = 0$ и спин $s_\gamma = 1$, у него существует только два независимых состояния поляризации и $g_\gamma = 2$), то

$$g_A = (2s_p + 1)(2s_n + 1) = 4, \quad g_B = g_\gamma(2s_d + 1) = 6. \quad (2)$$

Импульсы относительного движения $p_{A, B}$, входящие в (1), равны импульсам соответствующих частиц в с. ц. и.: $p_A \equiv p_p = p_n$, $p_B \equiv p_\gamma = p_d$. Считая, что все частицы, участвующие в рассматриваемых реакциях, являются нерелятивистскими (за исключением, естественно, фотона; для последнего $E_\gamma \ll Mc^2$, M — масса нуклона), имеем согласно закону сохранения энергии

$$E_A = 2 \frac{p_A^2}{2M} = E_B = E_\gamma + E_d - \varepsilon \approx \hbar\omega - \varepsilon, \quad (3)$$

где ε — энергия связи дейтрона, ω — частота фотона. В выражении (3) мы пренебрегли E_d по сравнению с E_γ (как легко сообразить, для нерелятивистского дейтрона $E_d \ll E_\gamma$ при одинаковых импульсах дейтрона и фотона; это означает, что для системы $\gamma + d$ с. ц. и. практически совпадает с системой покоя дейтрона).

*) Аналогичное соотношение имеет место не только для полных, но и для дифференциальных сечений $d\bar{\sigma}/d\Omega$ реакций.

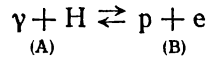
Учитывая, что $p_\gamma = \hbar\omega/c$, согласно (1)–(3) легко находим

$$\frac{\sigma_{\text{зхв}}}{\sigma_{\text{ф.-р}}} = \frac{3}{2} \frac{\hbar\omega}{Mc^2} \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega - \epsilon}. \quad (4)$$

Из (4) следует, что в нерелятивистском случае ($\hbar\omega \ll Mc^2$), вообще говоря, $\sigma_{\text{ф.-р}} \gg \sigma_{\text{зхв}}$. Исключением является узкая область значений $\hbar\omega$ вблизи порога реакции $\gamma + d \rightarrow p + n$ ($\hbar\omega \approx \approx \epsilon$), в которой, наоборот, $\sigma_{\text{ф.-р}} \ll \sigma_{\text{зхв}}$.

В заключение подчеркнем, что соотношение (4) не связано с каким-либо конкретным предположением о механизме реакции, а основано только на симметрии уравнений квантовой механики по отношению к изменению знака времени.

13.60. Задача решается аналогично предыдущей*). Усредненные по направлениям спинов сечения взаимно обратных реакций фотоэффекта и радиационной рекомбинации



связаны соотношением

$$\frac{\sigma_{\text{ф}}(\omega)}{\sigma_{\text{рек}}(\epsilon_e)} = \frac{p_e^2}{2p_\gamma^2} = \frac{\hbar\omega - |E_0|}{\hbar\omega} \frac{m_e c^2}{\hbar\omega}. \quad (1)$$

При получении (1) следует учесть, что с.ц.и. для рассматриваемых реакций совпадает с системами покоя атома H и протона, спиновый статистический вес атома водорода в основном $1s_{1/2}$ -состоянии, как и электрона, равен 2, энергии фотона и электрона связаны законом сохранения энергии

$$\hbar\omega + E_0 = \epsilon_e = p_e^2/2m_e,$$

где E_0 — энергия основного состояния атома водорода.

Г л а в а 14

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

14.1. Взаимодействие заряженной бесспиновой частицы с полем излучения (квантованным электромагнитным полем) имеет вид (в шредингеровском представлении)

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $\hat{\mathbf{A}}$ — оператор векторного потенциала,

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k} \right)^{1/2} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \quad (2)$$

*) Более того, рассмотренные в этих двух задачах процессы родственны по своей физической природе.

($\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$, $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+$ — операторы уничтожения и рождения фотона с волновым вектором \mathbf{k} и поляризацией σ ; $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ — вектор поляризации фотона *); использована кулоновская калибровка $\text{div } \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = 0$, при этом $\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} = 0$).

Взаимодействие (1) ответственно за переходы между различными состояниями системы «частица + фотоны» с гамильтонианом $\hat{H}_0 = \hat{H}_0^{\text{ч}} + \hat{H}_0^{\text{ф}}$, где $\hat{H}_0^{\text{ч}}$ — гамильтониан частицы во внешнем (неквантованном) поле (в данной задаче — гамильтониан атома водорода), $\hat{H}_0^{\text{ф}}$ — гамильтониан свободных фотонов.

Дифференциальная вероятность перехода в единицу времени определяется известным выражением теории возмущений

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 d\rho_f \quad (3)$$

($d\rho_f$ — плотность конечных состояний).

В рассматриваемой задаче в. ф. начального состояния имеет вид

$$\Psi_i = \Psi_{2p}(\mathbf{r}) | 0 \rangle_{\text{ф}},$$

где Ψ_{2p} — в. ф. $2p$ -состояния атома водорода (в дальнейшем, для определенности, будем считать, что в начальном состоянии $l_z = 0$, при этом $\Psi_{2p} \equiv \Psi_{n=2, l=1, m=0}$), $| 0 \rangle_{\text{ф}}$ есть в. ф. (точнее, вектор состояния) начального состояния системы фотонов в представлении чисел заполнения (это состояние — вакуум).

Как известно, с подавляющей вероятностью происходят переходы, в которых число фотонов изменяется на единицу. Поэтому, ограничиваясь рассмотрением только таких, доминирующих переходов, имеем в. ф. возможных конечных состояний

$$\Psi_f = \Psi_0(r) | 1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots \rangle,$$

где $\Psi_0 \equiv \Psi_{100}$ — в. ф. основного состояния атома водорода, $| 1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots \rangle$ — в. ф. состояния системы фотонов, в котором имеется только один фотон с импульсом $\hbar\mathbf{k}$ и поляризацией σ .

Для рассматриваемых переходов матричный элемент возмущения принимает вид ($\hat{\mathbf{A}}^2$ описывает двухфотонные переходы)

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = -\frac{e}{mc} \langle f | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}} | i \rangle = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \langle 100 | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | 210 \rangle. \quad (4)$$

Здесь учтено, что из всех слагаемых суммы (2) отличный от нуля вклад в матричный элемент вносит только одно, так как

$$\langle 1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots | \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^+ | 0 \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \langle 1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots | \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'} | 0 \rangle = 0.$$

*) Базисные векторы поляризации $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ выбраны вещественными, что соответствует фотонам с линейной поляризацией.

Для каждой из двух независимых поляризаций фотона число состояний равно ($\omega_k = c k \equiv \omega$)

$$\frac{V d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{V k^2 dk d\Omega_k}{(2\pi)^3} = \frac{V \omega^2 d\omega d\Omega_k}{(2\pi)^3 c^3},$$

и плотность конечных состояний рассматриваемой системы принимает вид

$$d\rho_f = \int \delta(E_f - E_i) \frac{V \omega^2 d\omega d\Omega_k}{(2\pi)^3 c^3} = \frac{V \omega_{21}^2 d\Omega_k}{(2\pi)^3 \hbar c^3},$$

где

$$E_i = E_{n=2}, \quad E_f = E_{n=1} + \hbar\omega, \quad \omega_{21} = \frac{1}{\hbar} (E_2 - E_1) = \frac{3me^4}{8\hbar^3}.$$

Таким образом, выражение (3) принимает вид

$$d\omega_{k\sigma} = \frac{e^2 \omega_{21}}{2\pi \hbar m^2 c^3} \left| \mathbf{e}_{k\sigma} \int \Psi_{100}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} \Psi_{210} d^3r \right|^2 d\Omega_k. \quad (5)$$

Интеграл в выражении (5) после замены $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \approx 1$ (дипольное приближение) принимает вид

$$\mathbf{p}_{12} = \int \Psi_{100}^* \hat{\mathbf{p}} \Psi_{210} dV = -im\omega_{21} \int \Psi_{100}^* \mathbf{r} \Psi_{210} dV = -im\omega_{21} \mathbf{r}_{12}. \quad (6)$$

Выполнив в (5) суммирование по поляризациям фотона с помощью формулы

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{e}_{k\sigma} \mathbf{p}_{12}|^2 &= \sum_{\sigma} (e_{k\sigma})_i (e_{k\sigma})_n (p_{12})_i (p_{12})_n^* = \\ &= \left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2} \right) (p_{12})_i (p_{12})_n^*, \end{aligned} \quad (7)$$

а после этого и интегрирование по всем углам вылета фотона, воспользовавшись значением интеграла

$$\int k_i k_n d\Omega_k = \frac{4\pi}{3} k^2 \delta_{in} \quad (8)$$

(\mathbf{k} — волновой вектор фотона, $ck = \omega_{21}$), находим полную вероятность перехода (в единицу времени)*):

$$\omega = \int \sum_{\sigma} d\omega_{k\sigma} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega_{21}^3}{\hbar c^3} |\mathbf{r}_{12}|^2. \quad (9)$$

Учитывая явный вид в. ф. ($a = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус)

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad \Psi_{210} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \frac{r}{2\sqrt{6}a^5} e^{-r/2a},$$

*) Это выражение можно записать в виде $\omega_{E1} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{21}^3}{\hbar c^3} |\mathbf{d}_{12}|^2$, в котором оно представляет одну из основных формул теории излучения в дипольном приближении.

легко находим компоненты векторного матричного элемента \mathbf{r}_{12}
 $(\mathbf{r}_{12})_x = (\mathbf{r}_{12})_y = 0$, $(\mathbf{r}_{12})_z = \frac{1}{4\pi\sqrt{2}a^4} \int (\cos^2\theta) r^4 e^{-3r/2} dr d\Omega = \frac{128\sqrt{2}}{243} a$.

Полная вероятность перехода принимает вид

$$\omega = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega_{21}^3 a^2}{\hbar c^3} \cdot 32 \left(\frac{2}{3}\right)^{10} = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{c}{a}. \quad (10)$$

Время жизни τ и ширина уровня Γ связаны с ω соотношениями

$$\tau = 1/\omega, \quad \Gamma = \hbar/\tau = \hbar\omega. \quad (11)$$

Для атома водорода согласно (10) и (11) имеем $\omega \approx 0,63 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$, $\tau \approx 1,60 \cdot 10^{-9} \text{ с}$, $\Gamma \approx 0,41 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$.

Время жизни $2p$ -уровня μ -мезоатома ($m_\mu \approx 207m_e$) составляет $\approx 10^{-11} \text{ с}$. Это значение много меньше времени жизни свободного мюона и позволяет понять то обстоятельство, что μ -мезон, будучи захваченным на атомную орбиту, успевает до своего распада путем ряда каскадных переходов перейти на основной уровень.

14.2. Задача решается аналогично предыдущей. Так как первый возбужденный уровень осциллятора имеет момент $l=1$ (см., например, 4.23, 4.24, 4.25), его время жизни определяется в основном однофотонным излучением, носящим дипольный характер.

Для вычисления вероятности перехода следует воспользоваться формулой (9) предыдущей задачи, положив в ней $\omega_{21} = \omega = \sqrt{k/m}$, и учесть явный вид в.ф. начального и конечного состояний осциллятора ($a = \sqrt{\hbar/m\omega}$)

$$\begin{aligned} \Psi_2 &= \Psi_{n_1=0, n_2=0, n_3=1} = (\sqrt{\pi} a)^{-3/2} \frac{\sqrt{z}}{a} z e^{-r^2/2a^2} = \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a} (\sqrt{\pi} a)^{-3/2} (\cos\theta) r e^{-r^2/2a^2}, \\ \Psi_1 &= \Psi_{000} = (\sqrt{\pi} a)^{-3/2} e^{-r^2/2a^2} \end{aligned}$$

при расчете матричного элемента \mathbf{r}_{12} (считаем для определенности, что в начальном состоянии $l_z = 0$).

Элементарное интегрирование дает

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_{12})_x &= x_{12} = 0, \quad (\mathbf{r}_{12})_y = 0, \\ (\mathbf{r}_{12})_z &= \int \Psi_1^* z \Psi_2 dV = \frac{\sqrt{2}}{a} (\sqrt{\pi} a)^{-3} \iiint z^2 e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{a^2}} dx dy dz = \frac{a}{\sqrt{2}}, \end{aligned}$$

и вероятность перехода (в единицу времени) оказывается равной

$$\omega = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega^3 a^2}{\hbar c^3} = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \left(\frac{\hbar\omega}{mc^2}\right) \omega$$

($\omega \ll \omega$, так как $e^2/\hbar c \approx 1/137$ и $\hbar\omega \ll mc^2$).

Время жизни уровня $\tau = 1/\omega$,

14.3. В дипольном приближении вероятность перехода $\omega \propto |\langle 1 | \mathbf{d} | 2 \rangle|^2$.

а) Оператор дипольного момента $\mathbf{d} = -e \sum_a \mathbf{r}_a$ не зависит от спиновых переменных и поэтому коммутирует с оператором квадрата суммарного спина электронов $\hat{\mathbf{S}}^2$. Если начальное состояние отвечает определенному значению суммарного спина S_2 (напомним, что мультиплетность равна $(2S + 1)$), то векторная функция $\Psi = \mathbf{d}\Psi_2$ также является с. ф. \mathbf{S}^2 , отвечающей тому же с. з. S_2 . В случае, когда в. ф. конечного состояния Ψ_1 отвечает значению суммарного спина $S_1 \neq S_2$, имеем $\langle 1 | \mathbf{d} | 2 \rangle = 0$ из-за ортогональности с. ф. эрмитова оператора \mathbf{S}^2 , отвечающих различным с. з., и дипольные переходы отсутствуют.

б) Как известно, в. ф. стационарных состояний атома представляют (приближенно) определенные комбинации произведений в. ф. отдельных электронов $\Psi_{n_r, l, m}(\mathbf{r}) \chi_{s_z}$ в самосогласованном поле (с различными квантовыми числами n_r, l, m, s_z). При этом в. ф. любого состояния терма содержит одинаковое число одноэлектронных в. ф. с данными квантовыми числами n_r, l (т. е. числа эквивалентных электронов для всех состояний данного терма — одинаковые). Поэтому все состояния терма имеют одинаковую четность, равную $I = (-1)^{\sum l_a}$ (сумма берется по всем электронам; фактически значение четности определяется электронами незаполненных оболочек).

Матричные элементы дипольного момента между состояниями с одинаковой четностью тождественно равны нулю (см., например, 1.21), что и доказывает невозможность дипольных переходов между различными компонентами тонкой структуры одного и того же терма.

14.4. Рассматриваемый переход имеет дипольный характер. Общее выражение для вероятности однофотонного дипольного перехода из начального i -го состояния д. с. в конечное f -е имеет вид

$$\omega_{if} = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2, \quad (1)$$

где \mathbf{d}_{fi} — матричный элемент дипольного момента системы, $\hbar\omega = E_i - E_f$ — энергия излучаемого фотона.

Для получения искомой оценки ω в (1), очевидно, следует взять $d_{fi} \sim ea$ и учесть значение $\hbar\omega = \Delta E_{LS} = 7 \cdot 10^{-18}$ эрг. В результате находим ($a \sim 10^{-8}$ см, $e \approx 5 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ)

$$\omega \sim \frac{(\Delta E_{LS})^3 e^2 a^2}{\hbar^4 c^3} \sim 3 \cdot 10^{-10} \text{ с}^{-1},$$

что соответствует времени жизни (по отношению к рассматриваемому переходу), $\tau = 1/\omega \approx 3 \cdot 10^9 \text{ с} \approx 100 \text{ лет}$ (1 год $\approx 3,14 \cdot 10^7 \text{ с}$),

14.5. Задача решается аналогично 14.1. В выражении $\hat{V} = -\mathbf{d}\hat{\mathcal{E}}_{\text{rad}}(\mathbf{r})$ оператор электрического поля фотонов имеет вид

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{E}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{c} \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{1}{c} \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0^y, \hat{\mathbf{A}}]_- = \\ &= i \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{V}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \{ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \}\end{aligned}\quad (1)$$

(использованы обозначения задачи 14.1; $\hat{H}_0^y = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ — гамильтониан свободных фотонов, \mathbf{r} — радиус-вектор центра инерции ротатора; в дальнейшем будем пренебрегать отдаленностью при излучении и считать ротатор локализованным в точке $\mathbf{r} = 0$ — точно так же в задачах об излучении атома обычно ядро считают локализованным в точке $\mathbf{R} = 0$).

В. ф. начального состояния системы (вакуум фотонов и ротатор на первом возбужденном уровне, момент которого $l = 1$) имеет вид

$$\Psi_i = Y_{10}(\theta, \varphi) |0\rangle_{\mathbf{y}} = -i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta |0\rangle_{\mathbf{y}}$$

(для определенности считаем $l_z = 0$). В. ф. конечного состояния:

$$\Psi_f = Y_{00} |1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots\rangle = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} |1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots\rangle$$

(ротатор в основном состоянии и один фотон с квантовыми числами \mathbf{k}, σ ; значение $k = \omega/c$ определяется законом сохранения энергии $\hbar\omega = E_{l=1} - E_{l=0} = \hbar^2/I$, см. 4.3).

Дифференциальная вероятность перехода (в единицу времени) равна (сравнить с решением задачи 14.1; $\mathbf{d} = d\mathbf{n}$, \mathbf{n} — единичный вектор вдоль оси ротатора)

$$dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 d\rho_f = \frac{d^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \int \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \mathbf{n} \cos\theta d\Omega_{\mathbf{n}} \right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \quad (2)$$

(не путать элементы телесных углов $d\Omega_{\mathbf{n}}$ — ориентации оси ротатора и $d\Omega_{\mathbf{k}}$ — вылета фотона!).

Введя обозначение $\mathbf{a} \equiv \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \int \mathbf{n} \cos\theta d\Omega_{\mathbf{n}}$ и используя представление

$$|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\mathbf{a}|^2 = (e_{\mathbf{k}\sigma})_i (e_{\mathbf{k}\sigma})_k a_i a_k,$$

выполним в (2) суммирование по поляризациям фотона, воспользовавшись соотношением

$$\sum_{\sigma=1,2} (e_{\mathbf{k}\sigma})_i (e_{\mathbf{k}\sigma})_k = \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right).$$

При этом получаем

$$dw_{\mathbf{k}} = \sum_{\sigma} dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{d^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) a_i a_k d\Omega_{\mathbf{k}}$$

и, выполнив в этом выражении интегрирование по направлениям вылета фотона (с использованием формулы (8) задачи 14.1), находим полную вероятность перехода:

$$\omega = \int d\omega_k = \frac{4}{3} \frac{d^2\omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{a}|^2 \quad (3)$$

(так как вектор $d\mathbf{a}$ представляет матричный элемент дипольного момента, то формула (3), естественно, согласуется с общим выражением для вероятности дипольного излучения).

Учитывая значения компонент вектора $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$, легко находим $a_x = a_y = 0$, $a_z = 1/\sqrt{3}$, и окончательное выражение для вероятности перехода принимает вид

$$\omega = \frac{4}{9} \cdot \frac{d^2\omega^3}{\hbar c^3} \quad (\omega = \hbar/I). \quad (4)$$

14.6. Ограничиваясь рассмотрением переходов, разрешенных в дипольном приближении, воспользуемся общей формулой для вероятности таких переходов (в единицу времени)

$$\omega = \frac{4}{3} \cdot \frac{\omega_{21}^3}{\hbar c^3} |\mathbf{d}_{12}|^2. \quad (1)$$

Применительно к данной задаче \mathbf{d}_{12} представляет матричный элемент дипольного момента молекулы между в. ф. начального Ψ_2 и конечного Ψ_1 состояний, относящихся к различным вращательным уровням одного и того же терма. В. ф. этих состояний имеют вид

$$\Psi = \Psi_{n, \Lambda=0}^{\text{эл}}(\mathbf{R}, \xi_1, \xi_2, \dots) \Psi_v^{\text{кол}}(R) Y_{KM}(\theta, \varphi)$$

(см., например, 11.60), причем квантовые числа $n, \Lambda = 0, v$ начального и конечного состояний — одинаковые, а вращательные (K, M) — различные. Выполнив в матричном элементе \mathbf{d}_{12} интегрирование по координатам электронов ξ_a (включая суммирование по их спиновым переменным) и относительно расстоянию R между ядрами, точно так же, как в 11.60, находим

$$\mathbf{d}_{12} = \int \Psi_1^* \mathbf{d} \Psi_2 d\tau = d \int Y_{K'M'}^* \mathbf{n} Y_{KM} d\Omega \quad (2)$$

(\mathbf{n} — единичный вектор вдоль оси, проходящей через ядра, его направление определяется углами θ, φ),

Так как энергия вращения молекулы $E_K = B_e \cdot K(K+1)$ ($B_e = \hbar^2/2I$ — ротационная постоянная), то легко заметить, что формула (1) с учетом (2) идентична выражению для вероятности излучения ротатора.

Вычисление интеграла (2) для первого возбужденного ротационного уровня с $K = 1$ и $M = 0$ (при этом $K' = 0$) обсуждалось в предыдущей задаче. Окончательное выражение для

вероятности излучения:

$$\omega = \frac{4}{9} \frac{d^2 \omega^3}{\hbar c^3} \quad (\omega = \hbar/I = 2B_e/\hbar). \quad (3)$$

Для получения грубой численной оценки (3) следует взять $d \sim eR_0$, $I = MR_0^2 \sim 3M_p R_0^2$ (считаем для определенности, что молекула содержит хотя бы один легкий атом, так что приведенная масса ядер $M \sim 3M_p$). В результате получаем ($R_0 \approx \approx 10^{-8}$ см, $e \approx 5 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ, $3M_p \approx 5 \cdot 10^{-24}$ г)

$$\omega \sim \frac{e^2 R_0^2}{c^3} \frac{\hbar^2}{I^3} \sim 10^{-7} \text{ с}^{-1}.$$

14.7. Взаимодействие частицы с электромагнитным полем имеет вид

$$\hat{U} = -\hat{\mu} \mathcal{H}_0 - \hat{\mu} \hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где смысл первого слагаемого очевиден, а второе описывает взаимодействие спинового магнитного момента с полем излучения. При этом оператор $\hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}$ имеет вид (по поводу оператора $\hat{\mathbf{A}}$ см. 14.1)

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) = \text{rot } \hat{\mathbf{A}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\frac{2\pi \hbar c^2}{V \omega_{\mathbf{k}}} \right)^{1/2} [i \mathbf{k} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}] (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}); \quad (2)$$

в этих выражениях \mathbf{r} — радиус-вектор частицы. Пренебрегая влиянием движения частицы на излучение, будем рассматривать только спиновую степень свободы, полагая $\mathbf{r} = 0$. При этом слагаемое $\hat{H}_0 \equiv -\hat{\mu} \mathcal{H}_0 = -\mu \mathcal{H}_0 \hat{\sigma}_z$ в (1) (ось z направлена вдоль поля) имеет смысл невозмущенного гамильтониана системы (спиновой подсистемы). Его с. ф. и с. з. очевидны:

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad E_1^{(0)} = -\mu \mathcal{H}_0; \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad E_2^{(0)} = \mu \mathcal{H}_0. \quad (3)$$

Считая для определенности, что $\mu > 0$, замечаем, что $E_2^{(0)} > E_1^{(0)}$ и под действием возмущения $\hat{V} = -\hat{\mu} \hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}(0)$ возможен переход из состояния Ψ_2 в Ψ_1 , сопровождающийся излучением фотона с энергией $\hbar\omega = E_2^{(0)} - E_1^{(0)} = 2\mu \mathcal{H}_0$.

Для дифференциальной вероятности такого перехода (в единицу времени) получаем (совершенно аналогично тому, как это было сделано при решении задачи 14.1) следующее выражение:

$$d\omega_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 d\rho_f = \frac{\mu^2 \omega}{2\pi \hbar c} |[\mathbf{k} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}] \Psi_1^{\dagger} \hat{\sigma} \Psi_2|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}. \quad (4)$$

Представив это выражение в виде

$$d\omega_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\mu^2 \omega}{2\pi \hbar c} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{a}_{12}|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{\mu^2 \omega}{2\pi \hbar c} (e_{\mathbf{k}\sigma})_i (e_{\mathbf{k}\sigma})_n (a_{12})_i (a_{12})_n^* d\Omega_{\mathbf{k}}, \quad (5)$$

где

$$\mathbf{a}_{12} = [\mathbf{k} (\Psi_1^{\dagger} \hat{\sigma} \Psi_2)] \equiv [\mathbf{k} \sigma_{12}],$$

выполним в (5) сначала суммирование по поляризациям фотона (точно так же, как в 14.1):

$$\begin{aligned} d\omega_{\mathbf{k}} &= \sum_{\sigma} d\omega_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\mu^2\omega}{2\pi\hbar c} |\mathbf{a}_{12}|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = \\ &= \frac{\mu^2\omega}{2\pi\hbar c} \{k^2 |\sigma_{12}|^2 - (\mathbf{k}\sigma_{12})(\mathbf{k}\sigma_{12})^*\} d\Omega_{\mathbf{k}}, \end{aligned}$$

а затем интегрирование по всем направлениям вылета фотона:

$$\omega = \int d\omega_{\mathbf{k}} = \frac{4\mu^2\omega^3}{3\hbar c^3} |\sigma_{12}|^2$$

(предварительно записав $(\mathbf{k}\sigma_{12})(\mathbf{k}\sigma_{12})^* = k_i k_n (\sigma_{12})_i (\sigma_{12})_n^*$ и воспользовавшись формулой (8) задачи 14.1).

Учитывая явный вид функций $\Psi_{1,2}$ и матриц Паули, легко находим

$$(\sigma_{12})_x = 1, \quad (\sigma_{12})_y = -i, \quad (\sigma_{12})_z = 0$$

и окончательное выражение для полной вероятности излучения:

$$\omega = \frac{8\mu^2\omega^3}{3\hbar c^3} = \frac{64\mu^5\mathcal{H}_0^3}{3\hbar^4 c^3}.$$

14.8. Взаимодействие электрона с полем излучения имеет вид

$$\hat{V} = \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2 + \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}} \quad (1)$$

(последнее слагаемое в (1) представляет взаимодействие спинового магнитного момента, равного $-\hbar/2mc$, с полем излучения; явный вид операторов $\hat{\mathbf{A}}$ и $\hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}$ приведен в решениях задач 14.1 и 14.7).

Матричный элемент возмущения (1) для однофотонного перехода из $2s_{1/2}$ - в $1s_{1/2}$ -состояние имеет вид (сравнить с решениями указанных задач 14.1 и 14.7)

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{V} | i \rangle &= \langle f | \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}} + \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}} | i \rangle = \\ &= \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \langle \Psi_1 | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left\{ \hat{\mathbf{p}} - \frac{i\hbar}{2} [\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{k}] \right\} | \Psi_2 \rangle, \quad (2) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \Psi_2 &= \Psi_{200}\chi_2 = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} e^{-r/2a} (1 - r/2a) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \Psi_1 &= \Psi_{100}\chi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \chi_1 \end{aligned}$$

(Ψ_{nlm} — в. ф. атома водорода, $\chi_{1,2}$ — спиновые функции электрона, причем для определенности считаем, что в начальном состоянии $s_z = j_z = +1/2$).

Учитывая сферическую симметрию в. ф. $\Psi_{1,2}$, легко находим

$$\mathbf{e}_{k\sigma} \langle \Psi_1 | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | \Psi_2 \rangle = 0.$$

Действительно, векторный матричный элемент $\langle \Psi_1 | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | \Psi_2 \rangle$ зависит от единственного вектора \mathbf{k} и поэтому пропорционален \mathbf{k} , но $\mathbf{k}\mathbf{e}_{k\sigma} = 0$. Таким образом, выражение (2) принимает вид

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = -\frac{ie\hbar}{2m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}} \langle \Psi_{100} | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | \Psi_{200} \rangle \mathbf{e}_{k\sigma} \langle \chi_1 | [\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{k}] | \chi_2 \rangle. \quad (3)$$

Для вычисления матричного элемента экспоненты $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ разложим ее в ряд ($|\mathbf{k}\mathbf{r}| \leq ka \ll 1$):

$$\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) = 1 - i\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{(\mathbf{k}\mathbf{r})^2}{2} + \dots$$

Первые два члена разложения дают нуль (первый — из-за ортогональности в. ф., второй — из-за нечетности подынтегральной функции), так что

$$\langle \Psi_{100} | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | \Psi_{200} \rangle \approx -\frac{1}{2} \int \Psi_{100}^* \Psi_{200} (\mathbf{k}\mathbf{r})^2 dV. \quad (4)$$

Записав $(\mathbf{k}\mathbf{r})^2 = k_i k_k x_i x_k$ и учтя соотношение

$$\int x_i x_k d\Omega = \frac{4\pi}{3} r^2 \delta_{ik},$$

приводим интеграл (4) к виду, допускающему элементарное интегрирование:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{100} | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | \Psi_{200} \rangle &\approx -\frac{2\pi k^2}{3} \int_0^\infty r^4 \Psi_{100}^* \Psi_{200} dr = \\ &= -\frac{k^2}{3a^3 \sqrt{2}} \int_0^\infty e^{-3r/2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) r^4 dr = \frac{2^8 \sqrt{2}}{3^6} k^2 a^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Учитывая соотношения (3) и (5) и введя обозначение $\langle \chi_1 | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \chi_2 \rangle = \boldsymbol{\sigma}_{12}$, находим дифференциальную вероятность излучения фотона в виде

$$\begin{aligned} d\omega_{k\sigma} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 d\rho_f = \frac{|V_{fi}|^2}{(2\pi)^2 \hbar^2 c^3} V \omega^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = \\ &= \frac{2^{14} e^2 \hbar a^4 \omega^5}{3^{12} \pi m^2 c^7} |\mathbf{e}_{k\sigma} [\boldsymbol{\sigma}_{12}\mathbf{k}]|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \\ &(\hbar\omega = \hbar kc = E_{n=2} - E_{n=1} = 3e^2/8a). \end{aligned} \quad (6)$$

Выполнив в (6) суммирование по поляризациям фотона и интегрирование по направлениям его вылета (точно так же, как при решении задач 14.1 и 14.7), получаем

$$\omega = \frac{2^{17} \omega^7 e^2 \hbar a^4}{3^{13} m^2 c^9} |\boldsymbol{\sigma}_{12}|^2 = \frac{1}{3^6 \cdot 2^4} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^9 \frac{m e^4}{\hbar^3} |\boldsymbol{\sigma}_{12}|^2. \quad (7)$$

Значение выражения (7) зависит от спинового состояния электрона, описываемого спинором χ_1 . Чтобы получить полную вероятность перехода $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$, следует найти вероятности $\omega^{(1,2)}$ переходов в два независимых конечных состояния с $j_z = s_z = \pm 1/2$, для которых

$$\chi_1^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_1^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

и взять их сумму, т. е. $\omega = \omega^{(1)} + \omega^{(2)}$.

Элементарное вычисление дает

$$\sigma_{12} = \chi_1^* \hat{\sigma} \chi_2 = \chi_1^* \hat{\sigma} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{cases} (0, 0, 1) & \text{для } \chi_1 = \chi_1^{(1)}, \\ (1, i, 0) & \text{для } \chi_1 = \chi_1^{(2)}, \end{cases}$$

и полная вероятность оказывается равной

$$\omega = \frac{1}{3^5 \cdot 2^4} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^9 \frac{m e^4}{\hbar^3} \approx 0,62 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}, \quad (8)$$

что соответствует времени жизни $2s_{1/2}$ -уровня (по отношению к рассматриваемому переходу) $\tau = 1/\omega \approx 18$ дней.

Сравнение результатов данной задачи и 14.4 с вероятностью двухфотонного перехода $\omega = 7 \text{ с}^{-1}$ показывает, что в данном случае однофотонные переходы имеют существенно меньшую (на много порядков) вероятность, чем двухфотонный, т. е. они являются сильно подавленными.

В условиях 14.4 это подавление имеет очевидную причину: малость частоты излучаемого фотона ($\omega \propto \omega^3!$).

Подавление однофотонного перехода $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$, носящего магнитный дипольный характер, объясняется тем обстоятельством, что в пренебрежении запаздыванием ($e^{-ikr} \approx 1$) он является запрещенным из-за ортогональности пространственных частей в. ф., как это отмечалось выше. В связи с этим следует отметить, что малость матричного элемента (имеющая порядок величины $\hbar^2 a^2 \sim a^2$ и, соответственно, $\alpha^4 \sim 10^{-9}$ в выражении для вероятности излучения), возникающая при разложении экспоненты, оказывается имеющей такой же порядок величины, как и релятивистские поправки к в. ф. Учет последних приводит к увеличению значения вероятности (8) приблизительно в 10 раз, так что рассмотрение, проведенное в данной задаче, носит, фактически, лишь качественный характер.

14.9. В основном состоянии атома водорода с ядром — протоном триплетный уровень $S = 1$ сверхтонкой структуры выше синглетного $S = 0$ (разность энергий $\Delta E_{\text{HFS}} = 1420 \text{ МГц} \approx 9,4 \cdot 10^{-18} \text{ эрг}$). В. ф. этих состояний имеют вид (ограничимся, для определенности, триплетным состоянием с $S_z = 0$)

$$\begin{aligned} \Psi_2 &= \Psi_{100}(r) \chi_{S=1, S_z=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\} \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}, \\ \Psi_1 &= \Psi_{100}(r) \chi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_e \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\} \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}. \end{aligned} \quad (1)$$

Под влиянием взаимодействия с полем излучения

$$\hat{V} = \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2 + \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_e \hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}} \quad (2)$$

возможен однофотонный переход из триплетного состояния в синглетное (в выражении (2) мы пренебрегли взаимодействием магнитного момента протона с полем излучения, так как оно примерно в $M_p/m_e \sim 10^3$ раз слабее, чем для электрона).

Решение данной задачи дублирует решение предыдущей (к которому и отсылаем читателя за подробностями).

Матричный элемент возмущения (2) для однофотонного перехода между состояниями атома (1) имеет вид

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = -\frac{ie\hbar}{2m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}} \langle 100 | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | 100 \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \langle \chi_1 | [\hat{\boldsymbol{\sigma}}_e \mathbf{k}] | \chi_2 \rangle$$

($\chi_{1,2}$ — спиновые функции системы «электрон + протон» в начальном и конечном состояниях). Заменяв $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$ и элементарно вычислив компоненты вектора $\boldsymbol{\sigma}_{12} = \langle \chi_1 | \hat{\boldsymbol{\sigma}}_e | \chi_2 \rangle = (0, 0, 1)$, находим

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = -\frac{ie\hbar}{2m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} [\boldsymbol{\sigma}_{12} \mathbf{k}].$$

Дифференциальная вероятность излучения (в единицу времени)

$$d\omega_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 d\rho_f = \frac{e^2\hbar\omega}{8\pi m^2 c^3} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} [\boldsymbol{\sigma}_{12} \mathbf{k}]|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \quad (3)$$

($\hbar\omega = \Delta E_{\text{HFS}}$); после суммирования выражения (3) по поляризациям фотона и интегрирования по направлениям его вылета находим полную вероятность рассматриваемого перехода:

$$\omega = \frac{e^2\hbar\omega k^2 |\boldsymbol{\sigma}_{12}|^2}{3m^2 c^3} = \frac{1}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{(\Delta E_{\text{HFS}})^3}{m^2 c^4 \hbar} \approx 2,9 \cdot 10^{-15} \text{ с}^{-1},$$

что соответствует времени жизни триплетного уровня $\tau = 1/\omega \approx \approx 10^7$ лет.

14.10. Вероятности однофотонных электромагнитных переходов (в единицу времени) различной мультипольности для не слишком сильно возбужденных состояний атома по порядку величины равны:

$$a) \quad \omega_{E1} \sim \frac{d_{12}^2 \omega^3}{\hbar c^3} \sim \frac{e^2 a^2 \omega^3}{\hbar c^3} \quad (1)$$

(дипольный электрический, или $E1$ -переход);

$$б) \quad \omega_{M1} \sim \frac{\mu_{12}^2 \omega^3}{\hbar c^3} \sim \alpha^2 \frac{e^2 a^2 \omega^3}{\hbar c^3} \quad (2)$$

(дипольный магнитный, или $M1$ -переход);

$$в) \quad \omega_{E2} \sim \frac{Q_{12}^2 \omega^5}{\hbar c^5} \sim \left(\frac{\omega a}{c} \right)^2 \frac{e^2 a^2 \omega^3}{\hbar c^3} \quad (3)$$

(квадрупольный электрический, или $E2$ -переход),

где $d_{12} \sim ea$, $\mu_{12} \sim e\hbar/mc$, $Q_{12} \sim ea^2$ — характерные значения матричных элементов дипольного, магнитного, квадрупольного моментов ($a = \hbar^2/me^2$). Для переходов между уровнями различных термов $\hbar\omega \sim e^2/a$ и $\omega a/c \sim e^2/\hbar c$. При этом согласно (2) и (3) вероятности $M1$ - и $E2$ -переходов по порядку величины — одинаковые (если переходы не запрещены правилами отбора) и в $\alpha^{-2} \sim 10^4$ раз меньше вероятности $E1$ -перехода.

Специфика переходов между уровнями тонкой структуры одного и того же терма определяется следующими двумя обстоятельствами. Во-первых, эти уровни имеют одинаковую четность и $E1$ -переходы между ними запрещены (см. 14.3, б). Во-вторых, для таких переходов величина $\hbar\omega$ — порядка интервала тонкой структуры, т. е. $\hbar\omega \sim \alpha^2 E_{ат} \sim \alpha^2 e^2/a$, и сравнение (2) и (3) показывает, что при этом вероятность $E2$ -перехода в $\alpha^{-2} \sim 10^4$ раз меньше вероятности $M1$ -перехода. Таким образом, квадрупольное излучение сильно подавлено и доминирующими являются магнитные дипольные переходы. Так как для таких переходов правило отбора по моменту требует $|\Delta J| = 0, 1$, а энергия уровней тонкой структуры по мере увеличения значения J изменяется монотонно, то указанные доминирующие $M1$ -переходы осуществляются между соседними уровнями тонкой структуры терма. Грубая оценка вероятности излучения согласно (2) с $\hbar\omega \sim \alpha^2 e^2/a$ дает

$$\omega \sim \alpha^2 \frac{e^2 a^2}{\hbar^4 c^3} \alpha^6 \frac{e^6}{a^3} = \alpha^{12} \frac{c}{a} \sim 10^{-7} \text{ с}^{-1}.$$

14.11. Найдем вид в. ф. состояния фотона с $J = 0$ в импульсном представлении (в силу специфических свойств фотона для него в. ф. в координатном представлении в обычном смысле (как амплитуды вероятности) не существует).

Искомая в. ф. $\Phi_{J=0}$ должна зависеть только от векторов импульса $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и поляризации \mathbf{e} фотона (причем, очевидно, зависимость от вектора \mathbf{e} — линейная) и являться скаляром, т. е. не изменяться при вращениях системы координат, так как $J = 0$. Наиболее общий вид такой функции *):

$$\Phi_{J=0} = f(k)(\mathbf{e}\mathbf{k}) \quad (1)$$

($f(k)$ — произвольная функция). Однако в. ф. фотона должна удовлетворять условию поперечности его поляризации. Это означает, что амплитуда вероятности продольной поляризации, отвечающей $\mathbf{e} \parallel \mathbf{k}$, должна быть равна нулю. Положив в выражении (1) $\mathbf{e} = \mathbf{k}$ и потребовав, чтобы при этом $\Phi_{J=0} = 0$, легко

*) Обычно состояние фотона описывается с помощью фурье-компонент векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{k}, t)$ с использованием калибровки $\mathbf{k}\mathbf{A}(\mathbf{k}, t) = 0$, $\mathbf{A}_0(\mathbf{k}, t) = 0$. Связь такого способа описания фотона с используемым в 14.11 и 14.12 определяется по существу соотношением $\Phi \equiv e_{\alpha} A_{\alpha}$.

находим: $\Phi_{J=0} = f(k) k^2 = 0$, т. е. $f(k) \equiv 0$. Соответственно $\Phi_{J=0} \equiv 0$, так что состояний фотона с $J=0$ не существует.

Отсутствие состояний фотона с $J=0$ объясняет то обстоятельство, что «0→0»-переходы системы с излучением одного фотона строго запрещены и этот запрет связан, фактически, с поперечностью поляризации фотона.

14.12. В.ф. системы с $J=1$ и положительной четностью $I=+1$ представляет линейную комбинацию компонент аксиального вектора \mathbf{a} (при инверсии координат $I\mathbf{a} = +\mathbf{a}$). Этот аксиальный вектор должен выражаться через следующие векторы, характеризующие систему: $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ ($\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0$ в с.ц.и.); $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ — векторы поляризации фотонов. При этом зависимость \mathbf{a} от $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ — линейная. Наиболее общий вид такого аксиального вектора:

$$\mathbf{a} = f_1(k) ([\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2] \mathbf{k}) \mathbf{k} + f_2(k) [\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2] + f_3(k) (\mathbf{e}_2\mathbf{k}) [\mathbf{e}_1\mathbf{k}] + f_4(k) (\mathbf{e}_1\mathbf{k}) [\mathbf{e}_2\mathbf{k}], \quad (1)$$

где $f_1, \dots, f_4(k)$ — произвольные скалярные функции.

При перестановке переменных фотонов (при этом $\mathbf{k}_1 \leftrightarrow \mathbf{k}_2$, $\mathbf{e}_1 \leftrightarrow \mathbf{e}_2$ и $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$) выражение (1) преобразуется следующим образом:

$$\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a}' = -f_1([\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2] \mathbf{k}) \mathbf{k} - f_2([\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2]) + f_3(\mathbf{e}_1\mathbf{k}) [\mathbf{e}_2\mathbf{k}] + f_4(\mathbf{e}_2\mathbf{k}) [\mathbf{e}_1\mathbf{k}], \quad (2)$$

но так как фотоны являются тождественными бозонами, то должно быть $\mathbf{a}' = \mathbf{a}$ и из сравнения (1) и (2) следует $f_1 = f_2 = 0$, $f_3 = f_4$. Таким образом,

$$\mathbf{a} = f_3(k) \{(\mathbf{e}_2\mathbf{k}) [\mathbf{e}_1\mathbf{k}] + (\mathbf{e}_1\mathbf{k}) [\mathbf{e}_2\mathbf{k}]\}. \quad (3)$$

Теперь учтем условие поперечности поляризаций фотонов, которое требует, чтобы для продольных фотонов $\mathbf{e}_{1,2} \propto \mathbf{k}_{1,2} \propto \mathbf{k}$ в.ф. (и соответственно вектор \mathbf{a}) была равна нулю (см. предыдущую задачу). Подставив в (3) значение $\mathbf{e}_1 = \mathbf{k}$ и потребовав, чтобы при этом было выполнено условие $\mathbf{a} = 0$, находим $f_3(k) = 0$; соответственно $\mathbf{a} \equiv 0$, что и доказывает отсутствие состояний системы из двух фотонов с $J=1$ и $I=+1$.

Для состояний фотонов с $J=1$ и четностью $I=-1$ в.ф. является суперпозицией компонент полярного вектора \mathbf{v} (при инверсии $I\mathbf{v} = -\mathbf{v}$). Наиболее общий вид такого вектора следующий:

$$\mathbf{v} = g_1(k) (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2) \mathbf{k} + g_2(k) (\mathbf{e}_1\mathbf{k}) (\mathbf{e}_2\mathbf{k}) \mathbf{k} + g_3(k) (\mathbf{e}_1\mathbf{k}) \mathbf{e}_2 + g_4(k) (\mathbf{e}_2\mathbf{k}) \mathbf{e}_1. \quad (4)$$

При перестановке переменных обоих фотонов выражение (4), как легко заметить, преобразуется следующим образом:

$$\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}' = -g_1(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2) \mathbf{k} - g_2(\mathbf{e}_1\mathbf{k}) (\mathbf{e}_2\mathbf{k}) \mathbf{k} - g_3(\mathbf{e}_2\mathbf{k}) \mathbf{e}_1 - g_4(\mathbf{e}_1\mathbf{k}) \mathbf{e}_2.$$

Условие симметричности в. ф., требующее $\mathbf{v} = \mathbf{v}'$, дает $g_1 = g_2 = 0$, $g_3 = -g_4$, а из условия поперечности фотонов следует $g_3 = 0$, т. е. $\mathbf{v} \equiv 0$, что и доказывает отсутствие состояний с $J = 1, I = -1$.

Следствием результата задачи является заключение о запрете распадов частиц со спином $s = 1$ (векторных мезонов) на два фотона.

14.13. Найдем вероятность перехода (в единицу времени) системы «частица + фотон» из состояния, описываемого в. ф.

$$\Psi_i = |1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \dots\rangle \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_1\mathbf{r}/\hbar}; \quad \mathbf{p}_1 = 0, \quad E_i = \hbar\omega_1, \quad (1)$$

в состояние с в. ф.

$$\Psi_f = |1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_2\mathbf{r}/\hbar}, \quad E_f = \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \hbar\omega_2 \quad (2)$$

под действием возмущения

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}) \quad (3)$$

(явный вид оператора $\hat{\mathbf{A}}$ и используемые обозначения обсуждаются в 14.1).

Рассматриваемый процесс происходит во втором порядке теории возмущений по параметру « e » (фактически параметром разложения является $e^2/\hbar c$). Согласно общей формуле

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{fi} + \sum_{\nu}' \frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i - E_{\nu}} \right|^2 d\rho_f. \quad (4)$$

При этом в матричных элементах $V_{f\nu}$, $V_{\nu i}$, входящих в сумму по промежуточным состояниям ν , следует ограничиться лишь первым слагаемым в выражении (3) (учет второго слагаемого дал бы члены четвертого порядка по « e »), но так как $\hat{\mathbf{p}}\Psi_i \equiv 0$, то такие матричные элементы равны нулю, как и вся сумма в формуле (4), в целом. Поэтому вероятность перехода полностью определяется матричным элементом V_{fi} , равным

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{V} | i \rangle &= \frac{e^2}{2mc^2} \langle f | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{A}} | i \rangle = \\ &= \frac{2\pi\hbar e^2}{mV^2 \sqrt{\omega_1\omega_2}} (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2) \int e^{i\mathbf{p}_1\mathbf{r}/\hbar + i\mathbf{k}_1\mathbf{r} - i\mathbf{p}_2\mathbf{r}/\hbar - i\mathbf{k}_2\mathbf{r}} d^3r = \\ &= \frac{2\pi\hbar e^2}{mV \sqrt{\omega_1\omega_2}} (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2) \delta_{\mathbf{p}_1 + \hbar\mathbf{k}_1, \mathbf{p}_2 + \hbar\mathbf{k}_2} \quad (5) \end{aligned}$$

(мы используем обозначения \mathbf{e}_1 вместо $\mathbf{e}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}$ и т. д.).

Наличие в (5) множителя $\delta_{\mathbf{p}_1 + \hbar\mathbf{k}_1, \mathbf{p}_2 + \hbar\mathbf{k}_2}$ выражает закон сохранения импульса в процессе рассеяния и означает, что конечное состояние системы полностью определяется кванто-

выми числами \mathbf{k}_2 , σ_2 фотона (при этом состояние частицы, однозначно задаваемое ее импульсом, определяется законом сохранения импульса). Поэтому при определении плотности конечных состояний следует рассматривать только состояния фотона. Пренебрегая энергией отдачи частицы

($p_2 \sim \hbar k_{1,2} \ll mc$, $E_2 = p_2^2/2m \sim \hbar^2 k_{1,2}^2/m \equiv \hbar k_{1,2} c \frac{\hbar k_{1,2}}{mc} \ll \hbar \omega_{1,2}$), находим, как и в 14.1 ($E_f \approx \hbar \omega_2$),

$$d\rho_f = \frac{V\omega^2 d\Omega_2}{(2\pi)^3 \hbar c^3} \quad (\omega_1 \approx \omega_2 \equiv \omega),$$

и выражение (4) принимает вид

$$d\omega = \frac{e^4}{m^2 c^3 V} |(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)|^2 d\Omega_2. \quad (6)$$

Используя соотношение $d\sigma = d\omega/j = d\omega/\rho c = V d\omega/c$ ($\rho = 1/V$ — объемная плотность числа фотонов), находим дифференциальное сечение упругого рассеяния фотонов заряженной частицей.

Записав $(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2 \equiv e_{1i} e_{1k} e_{2i} e_{2k}$ и выполнив в формуле (6) усреднение по поляризациям падающих и суммирование по поляризациям рассеянных фотонов с помощью соотношений

$$\overline{(\mathbf{e}_{k\sigma})_i (\mathbf{e}_{k\sigma})_n} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (\mathbf{e}_{k\sigma})_i (\mathbf{e}_{k\sigma})_n = \frac{1}{2} \left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2} \right),$$

легко находим дифференциальное и полное сечения рассеяния неполяризованных фотонов (θ — угол рассеяния):

$$d\sigma = \frac{e^4}{2m^2 c^4} (1 + \cos^2 \theta) d\Omega, \quad (7)$$

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{m^2 c^4} \equiv \frac{8\pi}{3} r_0^2. \quad (8)$$

Здесь $r_0 = e^2/mc^2$ — классический радиус заряженной частицы.

Выражения (7), (8) не содержат постоянной Планка и совпадают с соответствующими результатами классической электродинамики.

14.14. Переход из начального состояния, описываемого в. ф.

$$\Psi_i = |1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \dots\rangle Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} |1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \dots\rangle, \quad E_i = \hbar \omega_1,$$

в конечное

$$\Psi_f = |1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} |1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle, \quad E_f = \hbar \omega_2$$

под влиянием возмущения

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}} \hat{\mathbf{E}}_{\text{rad}}(0) = -d\mathbf{n} \hat{\mathbf{E}}_{\text{rad}}(0),$$

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{rad}}(0) = i \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} - \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+)$$

(см. 14.5; мы рассматриваем только внутреннюю степень свободы ротатора, считая его, как целое, локализованным в точке $\mathbf{r} = 0$) происходит во втором порядке теории возмущений, и его вероятность (в единицу времени) определяется общей формулой ($V_{fi} \equiv 0$)

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\nu}' \frac{\langle f | \hat{V} | \nu \rangle \langle \nu | \hat{V} | i \rangle}{E_i - E_{\nu}} \right|^2 d\rho_f. \quad (1)$$

Легко заметить, что отличный от нуля вклад в сумму в (1) дают лишь следующие промежуточные состояния:

- 1) $\Psi_{\nu} = Y_{1m}(\theta, \varphi) | 1_{k_1\sigma_1}, 1_{k_2\sigma_2}, 0, \dots \rangle, \quad E_{\nu} = \hbar^2/I + \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2,$
- 2) $\Psi_{\nu} = Y_{1m}(\theta, \varphi) | 0, 0, \dots \rangle, \quad E_{\nu} = \hbar^2/I,$

в которых ротатор находится на первом возбужденном уровне с $l = 1$ (в остальных случаях матричный элемент возмущения $V \propto d\mathbf{n}$ равен нулю). Учитывая, что $E_i = \hbar^2 l(l+1)/2I$, $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$ — частоты падающего и рассеянного фотонов одинаковы, а также учитывая выражение

$$d\rho_f = \frac{V\omega^2 d\Omega_2}{(2\pi)^3 \hbar c^3},$$

находим согласно (1)

$$d\omega = \frac{\omega^4 d^4}{Vc^3} \left| \sum_{m=-1}^1 \langle l=0, m=0 | n_i | 1, m \rangle \langle 1, m | n_k | 0, 0 \rangle \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{e_{1k}e_{2i}}{\hbar\omega - \hbar^2/I} + \frac{e_{1i}e_{2k}}{-\hbar\omega - \hbar^2/I} \right] \right|^2 d\Omega_2. \quad (2)$$

Сумму по m в (2) легко вычислить:

$$\sum_m \langle 0, 0 | n_i | 1, m \rangle \langle 1, m | n_k | 0, 0 \rangle = \sum_{l,m} \langle 0, 0 | n_i | l, m \rangle \langle l, m | n_k | 0, 0 \rangle = \\ = \langle 0, 0 | n_i n_k | 0, 0 \rangle = \frac{1}{4\pi} \int n_i n_k d\Omega = \frac{1}{3} \delta_{ik} \quad (3)$$

(суммирование можно распространить на все значения l, m , так как для $l \neq 1$ имеет место равенство $\langle l \neq 1, m | n_k | 0, 0 \rangle \equiv 0$; в (3) учтена полнота системы шаровых функций $\sum_{l,m} | l, m \rangle \langle l, m | = \hat{1}$).

С учетом (3) выражение (2) принимает вид

$$d\omega = \frac{4}{9} \frac{\omega^4 d^4}{Vc^3} (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2 \left[\frac{\hbar^2/I}{\hbar^2\omega^2 - (\hbar^2/I)^2} \right]^2 d\Omega_2. \quad (4)$$

Записав $(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2 = e_{1i}e_{1k}e_{2i}e_{2k}$, выполним в (4) усреднение по поляризациям начального и суммирование по поляризациям рассеянного фотонов, используя соотношения

$$\overline{(\mathbf{e}_{k\sigma})_i (\mathbf{e}_{k\sigma})_n} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (\mathbf{e}_{k\sigma})_i (\mathbf{e}_{k\sigma})_n = \frac{1}{2} \left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2} \right).$$

В результате получаем (θ — угол рассеяния)

$$d\omega = \frac{2}{9} \frac{\omega^4 d^4}{V c^3} \left[\frac{I}{\hbar^2 - \omega^2 l^2} \right]^2 (1 + \cos^2 \theta) d\Omega.$$

Учитывая соотношение между сечением и вероятностью $d\sigma = d\omega/j$, где $j = \rho c = c/V$ ($\rho = 1/V$ — плотность числа фотонов), находим дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния фотонов ротатором:

$$\begin{aligned} d\sigma &= \frac{2\omega^4 d^4}{9c^4} \left[\frac{I}{\hbar^2 - \omega^2 l^2} \right]^2 (1 + \cos^2 \theta) d\Omega, \\ \sigma(\omega) &= \frac{32\pi\omega^4 d^4}{27c^4} \left[\frac{I}{\hbar^2 - \omega^2 l^2} \right]^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Согласно (5) имеем в предельных случаях

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &\approx \frac{32\pi\omega^4 d^4 l^2}{27\hbar^4 c^4} \quad \text{при } \omega l \ll \hbar, \\ \sigma(\omega) &\approx \frac{32\pi d^4}{27l^2 c^4} \quad \text{при } \omega l \gg \hbar. \end{aligned}$$

При $\hbar\omega \rightarrow \hbar^2/l$ сечение рассеяния неограниченно возрастает, что отражает его резонансный характер. Однако при таких частотах фотона формулы (5) непосредственно не применимы, так как при расчете сечения необходимо учитывать естественную ширину возбужденного уровня ротатора (с $l = 1$).

В связи с данной задачей см. также 14.17.

14.15. Найдем вероятность перехода (в единицу времени) системы «осциллятор + фотон» из начального состояния с в. ф.

$$\Psi_i = \Psi_{000}(r) | 1_{k_1\sigma_1}, 0, \dots \rangle, \quad E_i = \hbar\omega_1 + 3\hbar\omega_0/2$$

в конечное

$$\Psi_f = \Psi_{000}(r) | 1_{k_2\sigma_2}, 0, \dots \rangle, \quad E_f = \hbar\omega_2 + 3\hbar\omega_0/2$$

($\Psi_{n_1 n_2 n_3}$ — с. ф. гамильтониана осциллятора, отвечающие с. з. $E_N = \hbar\omega_0(N + 3/2)$, $N = (n_1 + n_2 + n_3)$, см. 4.23) под действием возмущения

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}) \quad (1)$$

(явный вид оператора $\hat{\mathbf{A}}$ приведен в 14.1).

Переход происходит во втором порядке теории возмущений по параметру « e » (точнее, параметром разложения является $e^2/\hbar c$), и его вероятность определяется согласно общей формуле

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{fi} + \sum_{\nu} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_{\nu}} \right|^2 d\rho_f. \quad (2)$$

При этом значение матричного элемента V_{fi} определяется вторым слагаемым выражения (1) ($\sim e^2$), а при вычислении

элементов V_{fv} , V_{vl} следует ограничиться лишь первым слагаемым в (1).

Дальнейшие вычисления проведем, используя дипольное приближение, т.е. заменяя экспоненциальные множители, входящие в выражение для \hat{A} , единицей: $e^{\pm i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \approx 1$ (для этого требуется $\hbar k_1 \ll p_0 = \sqrt{\hbar m \omega_0}$). Легко находим ($\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$).

$$V_{fi} = \frac{2\pi \hbar e^2}{Vm\omega} (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2). \quad (3)$$

Имеется два типа промежуточных состояний $|\nu\rangle$ в сумме в (2), дающих отличный от нуля вклад. Их в. ф. и энергия:

$$\begin{aligned} \Psi_\nu &= \Psi_{n_1 n_2 n_3} |0, 0, \dots\rangle, & E_\nu &= \hbar \omega_0 (N + 3/2), \\ \Psi_\nu &= \Psi_{n_1 n_2 n_3} |1_{k_1 \sigma_1}, 1_{k_2 \sigma_2}, 0, \dots\rangle, & E_\nu &= 2\hbar \omega + \hbar \omega_0 (N + 3/2). \end{aligned}$$

Используя известный вид матричных элементов оператора \hat{A} , легко приводим указанную сумму к виду (в дипольном приближении)

$$\begin{aligned} \sum'_\nu \frac{V_{fv} V_{vl}}{E_i - E_\nu} &= \frac{2\pi e^2}{Vm^2 \omega} \sum'_{n_1 n_2 n_3} \langle 0, 0, 0 | \hat{p}_i | n_1, n_2, n_3 \rangle \times \\ &\times \langle n_1, n_2, n_3 | \hat{p}_k | 0, 0, 0 \rangle \left\{ \frac{e_{2i} e_{1k}}{\omega - N\omega_0} + \frac{e_{1i} e_{2k}}{-\omega - N\omega_0} \right\}. \quad (4) \end{aligned}$$

Так как $\Psi_{n_1 n_2 n_3} = \Psi_{n_1}^{\text{осц}}(x) \Psi_{n_2}^{\text{осц}}(y) \Psi_{n_3}^{\text{осц}}(z)$ и матричный элемент импульса для линейного осциллятора $\langle m | \hat{p} | n \rangle$ отличен от нуля лишь при $|m - n| = 1$, замечаем, что отличны от нуля только такие слагаемые суммы (4), для которых $N = (n_1 + n_2 + n_3) = 1$ (при этом матричный элемент компоненты $\hat{p}_x \equiv \hat{p}_1$ в (4) не равен нулю лишь при $n_1 = 1, n_2 = n_3 = 0$, $\hat{p}_y \equiv \hat{p}_2$ — при $n_2 = 1, n_1 = n_3 = 0$, и аналогично для \hat{p}_z). При этом, как легко сообразить, имеет место равенство

$$\sum'_{n_1 n_2 n_3} \langle 0, 0, 0 | \hat{p}_i | n_1 n_2 n_3 \rangle \langle n_1 n_2 n_3 | \hat{p}_k | 0, 0, 0 \rangle = |\langle 1 | \hat{p} | 0 \rangle|^2 \delta_{ik} = \frac{\hbar m \omega_0}{2} \delta_{ik},$$

где $\langle 1 | \hat{p} | 0 \rangle = -\langle 0 | \hat{p} | 1 \rangle = i \sqrt{\hbar m \omega_0 / 2}$ — матричный элемент импульса линейного осциллятора.

С учетом сказанного выражение (2) легко привести к виду

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} e^4 \left(\frac{2\pi \hbar}{mV\omega} \right)^2 \frac{\omega^4 (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2} d\rho_f. \quad (5)$$

Используя запись $(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2 = e_{1i} e_{1k} e_{2i} e_{2k}$, выполним в (5) усреднение по поляризациям фотона в начальном состоянии и суммирование по поляризациям в конечном, используя соотношения

$$\overline{(\mathbf{e}_{k\sigma})_i (\mathbf{e}_{k\sigma})_n} \equiv \frac{1}{2} \sum_\sigma (\mathbf{e}_{k\sigma})_i (\mathbf{e}_{k\sigma})_n = \frac{1}{2} \left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2} \right).$$

В результате получим (θ — угол рассеяния)

$$d\omega = \frac{4\pi^3 \hbar e^4 \omega^2}{m^2 V^2 (\omega^2 - \omega_0^2)^2} (1 + \cos^2 \theta) d\rho_f.$$

Учитывая, что $d\rho_f = \frac{V \omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3}$, и воспользовавшись соотношением, связывающим сечение и вероятность процесса ($\rho = 1/V$ — плотность числа фотонов): $d\sigma = \frac{d\omega}{j} = \frac{d\omega}{\rho c} = \frac{V d\omega}{c}$, получаем окончательные выражения для дифференциального и полного сечений упругого рассеяния фотона заряженным осциллятором:

$$d\sigma = \frac{e^4 \omega^4 (1 + \cos^2 \theta)}{2m^2 c^4 (\omega^2 - \omega_0^2)^2} d\Omega, \quad (6)$$

$$\sigma(\omega) = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4 \omega^4}{m^2 c^4 (\omega^2 - \omega_0^2)^2}. \quad (7)$$

Полученные выражения (6), (7) не содержат постоянной Планка и совпадают с соответствующими результатами классической электродинамики.

14.16. Рассматривая только спиновую степень свободы, считаем, для определенности, частицу локализованной в точке $\mathbf{r} = 0$. Найдем вероятность перехода системы из начального состояния

$$\Psi_i = \chi_1 |1_{k_1\sigma_1}, 0, \dots\rangle, \quad E_i = \hbar\omega_1 \quad (1)$$

в конечное

$$\Psi_f = \chi_2 |1_{k_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle, \quad E_f = \hbar\omega_2 \quad (2)$$

($\chi_{1,2}$ — соответствующие спиновые функции) под действием возмущения (см. 14.7)

$$\hat{V} = -\hat{\mu}\hat{\mathcal{H}}_{\text{rad}}(0) = -i\mu\hat{\sigma} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} [\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}] (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} - \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+). \quad (3)$$

Переход происходит во втором порядке теории возмущений, и его вероятность рассчитывается по общей формуле

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\mathbf{v}}' \frac{V_{f\mathbf{v}} V_{\mathbf{v}i}}{E_i - E_{\mathbf{v}}} \right|^2 d\rho_f. \quad (4)$$

В данной задаче сумма по промежуточным состояниям $|\mathbf{v}\rangle$ содержит четыре слагаемых, соответствующих состояниям, описываемым в. ф.:

$$\Psi_{\mathbf{v}} = \chi_{s_2} |0, 0, \dots\rangle, \quad E_{\mathbf{v}} = 0,$$

$$\Psi_{\mathbf{v}} = \chi_{s_2} |1_{k_1\sigma_1}, 1_{k_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle, \quad E_{\mathbf{v}} = 2\hbar\omega,$$

где, как обычно, $\chi_{s_2=1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi_{s_2=-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$; учтено также равенство энергий (частот) фотонов: $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$.

Легко заметить, что сумма в (4) принимает вид

$$\sum_{\nu}^{\prime} \frac{V_{f\nu} V_{\nu l}}{E_i - E_{\nu}} = \frac{2\pi c^2 \mu^2}{V \omega^2} \sum_{s_z} \{ (\chi_{2\hat{\sigma}}^* [\mathbf{e}_2 \mathbf{k}_2] \chi_{s_z}) (\chi_{s_z}^* \hat{\sigma} [\mathbf{e}_1 \mathbf{k}_1] \chi_1) - (\chi_{2\hat{\sigma}}^* [\mathbf{e}_1 \mathbf{k}_1] \chi_{s_z}) (\chi_{s_z}^* \hat{\sigma} [\mathbf{e}_2 \mathbf{k}_2] \chi_1) \}. \quad (5)$$

Для выполнения суммирования по s_z следует записать в явном виде правую часть выражения (5) (так, первое слагаемое в фигурных скобках имеет вид

$$\chi_{2\hat{\sigma}}^* \sigma_{\alpha\beta} [\mathbf{e}_2 \mathbf{k}_2] \chi_{s_z, \beta} \cdot \chi_{s_z, \nu}^* \sigma_{\nu\delta} [\mathbf{e}_1 \mathbf{k}_1] \chi_{1\delta},$$

аналогично расписывается второе слагаемое) и воспользоваться соотношением

$$\sum_{s_z} \chi_{s_z, \beta} \chi_{s_z, \nu}^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{\beta} (1 \ 0)_{\nu} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_{\beta} (0 \ 1)_{\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_{\beta\nu} = \delta_{\beta\nu}.$$

В результате выражение (5) оказывается равным

$$\sum_{\nu}^{\prime} \frac{V_{f\nu} V_{\nu l}}{E_i - E_{\nu}} = \frac{2\pi c^2 \mu^2}{V \omega^2} \chi_2^* \{ \hat{\sigma}_i a_{2i} \hat{\sigma}_k a_{1k} - \hat{\sigma}_k a_{1k} \hat{\sigma}_i a_{2i} \} \chi_1, \quad (6)$$

где введены обозначения

$$\mathbf{a}_{1,2} = [\mathbf{e}_{1,2} \mathbf{k}_{1,2}], \text{ т. е. } (a_{1,2})_l = \mathbf{e}_{lkl} (\mathbf{e}_{1,2})_k (\mathbf{k}_{1,2})_l. \quad (7)$$

Учитывая свойство матриц Паули

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k - \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i = 2i \mathbf{e}_{ikl} \hat{\sigma}_l,$$

выражение (6) можно упростить:

$$\sum_{\nu}^{\prime} \frac{V_{f\nu} V_{\nu l}}{E_i - E_{\nu}} = \frac{4i\pi c^2 \mu^2}{V \omega^2} a_{2i} a_{1k} \mathbf{e}_{ikl} \chi_2^* \hat{\sigma}_l \chi_1. \quad (8)$$

Так как $d\rho_f = \frac{V \omega^2 d\Omega_2}{(2\pi)^3 \hbar c^3}$, то согласно (4), (8) и формуле, связывающей вероятность и сечение процесса:

$$d\sigma = d\omega/j = d\omega/\rho c = V d\omega/c$$

($\rho = 1/V$ — плотность числа фотонов), получаем дифференциальное сечение рассеяния фотонов магнитным моментом в виде

$$d\sigma = \frac{4\mu^4}{\hbar^2 \omega^2} | \mathbf{e}_{ikl} a_{2i} a_{1k} \chi_2^* \hat{\sigma}_l \chi_1 |^2 d\Omega_2. \quad (9)$$

Выполним в формуле (9) усреднение по поляризациям падающих и суммирование по поляризациям рассеянных фотонов. Для этого представим квадрат модуля матричного элемента в (9) в виде

$$| (\sigma_l)_{21} \mathbf{e}_{ikl} a_{2i} a_{1k} |^2 = (\sigma_l)_{21} (\sigma_l)_{21}^* \mathbf{e}_{ikl} \mathbf{e}_{mnl} a_{2i} a_{1k} a_{2m} a_{1n}.$$

Учитывая (7), имеем

$$\begin{aligned} \overline{a_{1k}a_{1n}} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \epsilon_{ksp} (\mathbf{e}_{k_1\sigma_1})_s k_{1p} \epsilon_{nuw} (\mathbf{e}_{k_1\sigma_1})_u k_{1w} = \\ &= \frac{1}{2} k_{1p} k_{1w} \epsilon_{ksp} \epsilon_{nuw} \left(\delta_{su} - \frac{k_{1s} k_{1u}}{k^2} \right) = \frac{1}{2} \epsilon_{kps} \epsilon_{nws} k_{1p} k_{1w} \end{aligned}$$

и, аналогично,

$$\sum_{\sigma_2} a_{2i} a_{2m} = \epsilon_{tps} \epsilon_{mws} k_{2p} k_{2w}.$$

Далее выполним интегрирование по углам рассеяния фотона:

$$\begin{aligned} \int k_{2p} k_{2w} d\Omega_2 &= \frac{4\pi}{3} k^2 \delta_{pw}, \\ \int \sum_{\sigma_i} a_{2i} a_{2m} d\Omega_2 &= \frac{4\pi}{3} k^2 \epsilon_{tps} \epsilon_{mps} = \frac{8\pi}{3} k^2 \delta_{mi}. \end{aligned}$$

В результате указанных преобразований получаем сечение рассеяния в виде

$$\sigma = \frac{16\pi}{3} \frac{\mu^4}{\hbar^2 c^2} (\sigma_l)_{21} (\sigma_t)_{21}^* \epsilon_{ikt} \epsilon_{int} \epsilon_{kps} \epsilon_{nws} k_{1p} k_{1w}$$

или, учитывая известное соотношение $\epsilon_{ikt} \epsilon_{int} = \delta_{kn} \delta_{it} - \delta_{ki} \delta_{ln}$,

$$\sigma = \frac{16\pi}{3} \frac{\mu^4}{\hbar^2 c^2} (\sigma_l)_{21} (\sigma_t)_{21}^* \{ \delta_{lt} k^2 + k_{1t} k_{1l} \}. \quad (10)$$

Выражение (10) зависит от спинового состояния частицы до и после рассеяния. По условию задачи $\mathbf{k}_1 = (0, 0, k)$, $\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, и если $\chi_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (рассеяние без изменения ориентации спина), то $(\sigma)_{12} = (0, 0, 1)$ и сечение рассеяния равно

$$\sigma_{\uparrow\uparrow} = \frac{16\pi}{3} \frac{\mu^4}{\hbar^2 c^2} 2k^2 = \frac{32\pi}{3} \frac{\mu^4 \omega^2}{\hbar^2 c^4}. \quad (11)$$

В случае переворота спина $\chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ имеем $(\sigma)_{21} = (1, i, 0)$ и сечение рассеяния

$$\sigma_{\uparrow\downarrow} = \frac{32\pi}{3} \frac{\mu^4 \omega^2}{\hbar^2 c^4} = \sigma_{\uparrow\uparrow}. \quad (12)$$

Сумма выражений (11) и (12) представляет полное сечение рассеяния фотонов магнитным моментом частицы со спином $s = 1/2$.

Для частицы с произвольным спином s имеем $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{\mu}{s} \hat{\mathbf{s}}$. Читателю предлагается самостоятельно показать, сделав необходимые изменения в приведенном решении задачи, что полное сечение рассеяния фотонов на неполяризованных частицах в

В этом случае равно

$$\sigma = \frac{16\pi}{9} \frac{\mu^4 \omega^2}{\hbar^2 c^4} \frac{(s+1)}{s^3},$$

что при $s \gg 1$ совпадает с результатом классической электродинамики для сечения рассеяния электромагнитной волны магнитным моментом, усредненного по различным ориентациям момента в предположении их эквивалентности:

$$\sigma_{\text{кл}} = \frac{16\pi}{9} \left(\frac{\kappa \mu \omega}{c^2} \right)^2$$

(κ — гиромагнитное отношение — определяется соотношением $\mu = \kappa M$, M — механический момент частицы).

14.17. Решение может быть получено в результате простых преобразований в решении задачи 14.14. Так как матричные элементы $\langle L, M | \mathbf{n} | L', M' \rangle = 0$ при $|L - L'| \neq 1$, то во втором порядке теории возмущений, кроме упругого рассеяния, происходит неупругое рассеяние фотонов, при котором возбуждаются состояния ротатора только с $L = 2$. В. ф. возможных конечных состояний имеют вид

$$\Psi_f = Y_{2M} | 1_{k_2 \sigma_2}, 0 \rangle, \quad E_f = 3\hbar^2/I + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_1.$$

Совершенно аналогично тому, как это было сделано в решении задачи 14.14 (следует только учесть различие частот падающих ω_1 и рассеянных ω_2 фотонов), находим

$$d\sigma_M = \frac{\omega_1 \omega_2^3 d^4}{c^4} |\langle 2, M | n_i n_k | 0, 0 \rangle e_{1i} e_{2k}|^2 \left[\frac{I}{(\hbar + I\omega_2)(\hbar - I\omega_1)} \right]^2 d\Omega_2. \quad (1)$$

Выражение (1) зависит от значения M . Не интересуясь состоянием ротатора после столкновения, выполним в (1) суммирование по M . Для этого запишем

$$|\langle 2, M | n_i n_k | 0, 0 \rangle e_{1i} e_{2k}|^2 = e_{1i} e_{2k} e_{1l} e_{2m} \langle 0, 0 | n_l n_m | 2, M \rangle \langle 2, M | n_i n_k | 0, 0 \rangle$$

и воспользуемся соотношением

$$\begin{aligned} \sum_M \langle 0, 0 | n_l n_m | 2, M \rangle \langle 2, M | n_i n_k | 0, 0 \rangle &\equiv \\ &\equiv \sum_{LM} \langle 0, 0 | n_l n_m | L, M \rangle \langle L, M | n_i n_k | 0, 0 \rangle - \\ &- \langle 0, 0 | n_l n_m | 0, 0 \rangle \langle 0, 0 | n_i n_k | 0, 0 \rangle = \langle 0, 0 | n_l n_m n_i n_k | 0, 0 \rangle - \\ &- \langle 0, 0 | n_l n_m | 0, 0 \rangle \langle 0, 0 | n_i n_k | 0, 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{45} \{ 3\delta_{li} \delta_{km} + 3\delta_{lm} \delta_{kl} - 2\delta_{ik} \delta_{lm} \}, \end{aligned}$$

при выводе которого учтено, что слагаемые суммы по L, M отличны от нуля лишь при $L = 2$ и $L = 0$, использованы условие полноты системы шаровых функций $\sum_{LM} |L, M\rangle \langle L, M| = \hat{1}$ и из-

вестные значения интегралов

$$\begin{aligned}\langle 0, 0 | n_i n_k | 0, 0 \rangle &= \frac{1}{4\pi} \int n_i n_k d\Omega = \frac{1}{3} \delta_{ik}, \\ \langle 0, 0 | n_i n_m n_i n_k | 0, 0 \rangle &= \frac{1}{4\pi} \int n_i n_k n_i n_m d\Omega = \\ &= \frac{1}{15} (\delta_{ik} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}).\end{aligned}$$

Учитывая сказанное, легко получить дифференциальное сечение неупругого рассеяния фотонов, просуммированное по всем возможным состояниям ротатора, относящимся к уровню с $L = 2$:

$$d\sigma = \sum_M d\sigma_M = \frac{\omega_1 \omega_2^3 d^4}{45c^4} \left[\frac{I}{(\hbar + I\omega_2)(\hbar - I\omega_1)} \right]^2 [3 + (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2] d\Omega_2,$$

которое после усреднения и суммирования по поляризациям фотонов (соответственно до и после рассеяния) принимает вид

$$d\sigma = \frac{\omega_1 \omega_2^3 d^4}{90c^4} \left[\frac{I}{(\hbar + I\omega_2)(\hbar - I\omega_1)} \right]^2 (13 + \cos^2 \theta) d\Omega_2 \quad (2)$$

и приводит к следующему выражению для полного сечения неупругого рассеяния:

$$\sigma_{\text{неупр}} = \int d\sigma = \frac{16\pi}{27} \frac{\omega_1 \omega_2^3 d^4}{c^4} \left[\frac{I}{(\hbar + I\omega_2)(\hbar - I\omega_1)} \right]^2. \quad (3)$$

В предельных случаях формула (3) дает

$$\sigma_{\text{неупр}} \approx \frac{4\pi}{9} \frac{d^4 I}{\hbar^3 c^4} \left(\omega_1 - \frac{3\hbar}{I} \right)^3 \rightarrow 0, \quad \hbar\omega_1 \rightarrow 3\hbar^2/I \quad (4)$$

(т. е. вблизи порога), и

$$\sigma_{\text{неупр}} \approx \frac{16\pi}{27} \frac{d^4}{I^2 c^4}, \quad \omega_1 \approx \omega_2 \gg \hbar/I. \quad (5)$$

Выражение (5) не содержит постоянной Планка, как и сечение упругого рассеяния фотонов $\sigma_{\text{упр}}$, найденное в 14.14. При этом полное сечение рассеяния

$$\sigma_{\text{полн}} = \sigma_{\text{упр}} + \sigma_{\text{неупр}} = \frac{16\pi}{9} \frac{d^4}{I^2 c^4}$$

совпадает с результатом классической электродинамики.

14.18. При доказательстве следует учесть условие полноты системы с. ф. гамильтониана $\sum_m |m\rangle \langle m| = 1$, равенства $\omega_{mn} = -\omega_{nm}$ и $x_{mn} = (x_{nm})^*$, а также соотношения

$$\begin{aligned}\omega_{mn} x_{mn} &= \frac{1}{\hbar} \langle m | [\hat{H} \hat{x}] | n \rangle = -\frac{i}{\mu} \langle m | \hat{p}_x | n \rangle, \\ \omega_{mn}^2 x_{mn} &= -\frac{i\omega_{mn}}{\mu} \langle m | \hat{p}_x | n \rangle = -\frac{i}{\mu\hbar} \langle m | [\hat{H} \hat{p}_x] | n \rangle = \frac{1}{\mu} \langle m | \frac{\partial U}{\partial x} | n \rangle.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{а) } \sum_m |\langle m | x | n \rangle|^2 &\equiv \sum_m \langle n | x | m \rangle \langle m | x | n \rangle = \langle n | x^2 | n \rangle; \\
\text{б) } \sum_m \omega_{mn} |\langle m | x | n \rangle|^2 &\equiv \frac{i}{2\mu} \sum_m \{ \langle n | \hat{p}_x | m \rangle \langle m | x | n \rangle - \\
&- \langle n | x | m \rangle \langle m | \hat{p}_x | n \rangle \} = \frac{i}{2\mu} \langle n | \hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x | n \rangle = \frac{\hbar}{2\mu} \langle n | n \rangle = \frac{\hbar}{2\mu}; \\
\text{в) } \sum_m \omega_{mn}^2 |\langle m | x | n \rangle|^2 &\equiv \frac{1}{\mu^2} \sum_m \langle n | \hat{p}_x | m \rangle \langle m | \hat{p}_x | n \rangle = \frac{1}{\mu^2} \langle n | \hat{p}_x^2 | n \rangle; \\
\text{г) } \sum_m \omega_{mn}^3 |\langle m | x | n \rangle|^2 &= -\frac{i}{2\mu^2} \sum_m \left\{ \langle n | \frac{\partial U}{\partial x} | m \rangle \langle m | \hat{p}_x | n \rangle - \right. \\
&- \left. \langle n | \hat{p}_x | m \rangle \langle m | \frac{\partial U}{\partial x} | n \rangle \right\} = \frac{i}{2\mu^2} \langle n | \left[\hat{p}_x, \frac{\partial U}{\partial x} \right] | n \rangle = \frac{\hbar}{2\mu^2} \langle n | \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} | n \rangle.
\end{aligned}$$

Полученные соотношения справедливы, очевидно, и для y - и z -компонент \mathbf{r} . Если поле $U(r)$ — центральное и состояние $|n\rangle$ отвечает моменту $l=0$, т. е. является сферически симметричным, то правые части всех соотношений для всех трех компонент одинаковы (в силу эквивалентности различных направлений) и их можно записать в более симметричной форме:

$$\text{а) } \frac{1}{3} \langle n | r^2 | n \rangle; \quad \text{в) } \frac{1}{3\mu^2} \langle n | \hat{\mathbf{p}}^2 | n \rangle; \quad \text{г) } \frac{\hbar^2}{6\mu^2} \langle n | (\Delta U) | n \rangle.$$

14.19. В. ф. начального и конечного состояний системы «атом + фотон» имеют вид

$$\begin{aligned}
\Psi_i &= \Psi_0 |1_{k_i \sigma_i}, 0, \dots\rangle, \quad E_i = E_0 + \hbar\omega_i, \\
\Psi_f &= \Psi_0 |1_{k_f \sigma_f}, 0, \dots\rangle, \quad E_f = E_0 + \hbar\omega_f
\end{aligned}$$

(Ψ_0 — в. ф. атома). Переход происходит под действием возмущения

$$\hat{V} = \sum_{a=1}^Z \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_a) \hat{\mathbf{p}}_a + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{a=1}^Z \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}_a) \quad (1)$$

(суммирование проводится по всем электронам атома). Его вероятность (в единицу времени) отлична от нуля во втором порядке теории возмущений по параметру « e » и согласно общей формуле равна

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{fi} + \sum_{\nu} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_{\nu}} \right|^2 d\rho_f. \quad (2)$$

При этом значение матричного элемента V_{fi} определяется вторым слагаемым выражения (1) ($\sim e^2$), а при вычислении элементов $V_{f\nu}$, $V_{\nu i}$ следует ограничиться лишь первой суммой в (1).

Используя дипольное приближение, т. е. заменяя экспоненциальные множители, входящие в выражение для $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$, едини-

пей: $e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}} \approx 1$ (это оправдано тем, что $k = \omega/c \rightarrow 0$), легко находим

$$V_{fi} = \frac{2\pi Ze^2\hbar}{Vm\omega} (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2) \quad (3)$$

(Z — число электронов; учтено, что $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$).

В сумму в (2) по промежуточным состояниям $|v\rangle$ отличный от нуля вклад дают состояния двух типов. Их в. ф. и энергии:

$$\begin{aligned} \Psi_v &= \Psi_n |0, 0, \dots\rangle, & E_v &= E_n, \\ \Psi_v &= \Psi_n |1_{k_1\sigma_1}, 1_{k_2\sigma_2}, 0, \dots\rangle, & E_v &= E_n + 2\hbar\omega \end{aligned}$$

(Ψ_n и E_n — в. ф. и энергии стационарных состояний атома).

Учитывая известный вид матричных элементов оператора $\hat{A}(\mathbf{r})$, легко приводим указанную сумму к виду (в дипольном приближении)

$$\begin{aligned} \sum'_v \frac{V_{fv}V_{vi}}{E_i - E_v} &= \\ &= \frac{2\pi e^2}{m^2 V \omega} \sum'_n \sum_{a=1}^Z \sum_{b=1}^Z \langle 0 | \hat{p}_{ai} | n \rangle \langle n | \hat{p}_{bk} | 0 \rangle \left\{ \frac{e_{2i}e_{1k}}{\omega + \omega_{0n}} + \frac{e_{2k}e_{1i}}{\omega_{0n} - \omega} \right\}, \quad (4) \end{aligned}$$

где $\omega_{0n} = (E_0 - E_n)/\hbar$.

Воспользовавшись соотношением $\langle 0 | \hat{p}_a | n \rangle = im\omega_{0n} \langle 0 | \mathbf{r}_a | n \rangle$ и введя оператор дипольного момента атома $\mathbf{d} = -e \sum_{a=1}^Z \mathbf{r}_a$, выражение (4) можно записать в виде

$$\frac{2\pi}{V\omega} \sum'_n \omega_{0n}^2 \langle 0 | d_i | n \rangle \langle n | d_k | 0 \rangle \left\{ \frac{e_{2i}e_{1k}}{\omega_{0n} + \omega} + \frac{e_{2k}e_{1i}}{\omega_{0n} - \omega} \right\}. \quad (5)$$

Две суммы, содержащиеся в выражении (5), имеют следующую тензорную структуру:

$$\sum'_n \frac{\omega_{0n}^2 \langle 0 | d_i | n \rangle \langle n | d_k | 0 \rangle}{\omega_{0n} \pm \omega} = A_{\pm}(\omega) \delta_{ik} \quad (6)$$

(мы учли, что рассматриваемое состояние атома имеет момент $J=0$ и является сферически симметричным; суммирование по состояниям атома, включающее суммирование по проекции момента на ось квантования, сохраняет эту симметрию). Выполнив в (6) свертку по индексам i и k , находим

$$A_{\pm}(\omega) = \frac{1}{3} \sum'_n \frac{\omega_{0n}^2 \langle 0 | d_i | n \rangle \langle n | d_i | 0 \rangle}{\omega_{0n} \pm \omega} = \frac{1}{3} \sum'_n \frac{\omega_{0n}^2 |d_{0n}|^2}{\omega_{0n} \pm \omega}, \quad (7)$$

$$\sum'_v \frac{V_{fv}V_{vi}}{E_i - E_v} = \frac{2\pi}{V\omega} (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2) [A_+(\omega) + A_-(\omega)]. \quad (8)$$

Выполнив в (8) разложение по степеням ω , получаем

$$\sum_v' \frac{V_{fv}V_{vi}}{E_i - E_v} \approx \frac{4\pi(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2)}{3V\omega} \left\{ \sum_n' \omega_{0n} |\mathbf{d}_{0n}|^2 + \omega^2 \sum_n' \frac{|\mathbf{d}_{0n}|^2}{\omega_{0n}} \right\}. \quad (9)$$

Используя «правило сумм» и общую формулу для поляризуемости атома β_0 :

$$\sum_n' \omega_{0n} |\mathbf{d}_{0n}|^2 = -\frac{3Ze^2\hbar}{2m}, \quad \beta_0 = \frac{2}{3} \sum_n' \frac{|\langle n | \mathbf{d} | 0 \rangle|^2}{\hbar\omega_{n0}}$$

(«правило сумм» для случая одного электрона было фактически получено в предыдущей задаче, см. 14.18, б; обобщение на случай Z электронов представляется очевидным), легко замечаем, что выражение (2) принимает вид (следует учесть также формулу (3))

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\frac{2\pi\hbar\omega\beta_0}{V} (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2) \right]^2 d\Omega. \quad (10)$$

Переходя от вероятности к сечению, усредняя по поляризациям падающих фотонов и суммируя по поляризациям рассеянных фотонов (точно так же, как это было сделано при решении задачи 14.13), находим дифференциальное и полное сечения рассеяния:

$$d\sigma = \frac{\omega^4\beta_0^2}{2c^4} (1 + \cos^2\theta) d\Omega, \quad \sigma(\omega) = \frac{8\pi}{3} \frac{\beta_0^2}{c^4} \omega^4.$$

Эти выражения совпадают с результатом классической электродинамики.

14.20. Система «водородоподобный атом + фотон», находящаяся в состоянии, описываемом в. ф. ($a = \hbar^2/Ze^2m$)

$$\Psi_i = \Psi_0(\mathbf{r}) |1_{k\sigma}, 0, \dots\rangle = \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}} |1_{k\sigma}, 0, \dots\rangle, \quad E_i = \hbar\omega - \frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2}, \quad (1)$$

в результате поглощения фотона электроном, происходящего под действием возмущения

$$\hat{V} = \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}), \quad (2)$$

может перейти в состояние, в котором имеется только электрон в кулоновском поле ядра. Так как энергия электрона при этом равна $\epsilon_e = E_i = \hbar\omega - I \gg I = m(Ze^2)^2/2\hbar^2$, то можно пренебречь влиянием поля ядра на электрон и выбрать в. ф. возможных конечных состояний в виде

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} |0, 0, \dots\rangle, \quad E_f = \frac{p^2}{2m} \quad (3)$$

(более точно, для этого требуется выполнение условия $Ze^2/\hbar v_e = \frac{Z}{137} \frac{c}{v_e} \ll 1$). Вероятность перехода (в единицу времени) определяется согласно общей формуле

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 d\rho_f. \quad (4)$$

Учитывая явный вид оператора \hat{A} , приведенный в 14.1, находим

$$V_{fi} = \frac{e}{mc} (\hat{A}\hat{\mathbf{p}})_{fi} = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V^2\omega}} \frac{\mathbf{e}_{k\sigma}}{\sqrt{\pi a^3}} \int e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar + i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} e^{-r/a} d^3r. \quad (5)$$

Для вычисления интеграла в (5) сначала, используя эрмитовость $\hat{\mathbf{p}}$, перенесем его действие на экспоненту слева от него; возникающий при этом интеграл вычисляется в сферических координатах с полярной осью вдоль вектора $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{p}/\hbar - \mathbf{k}$:

$$\int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} e^{-r/a} d^3r = \hbar\boldsymbol{\kappa} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} - r/a} d^3r = \frac{8\pi a^3 \hbar\boldsymbol{\kappa}}{(1 + a^2\boldsymbol{\kappa}^2)^2}. \quad (6)$$

Учитывая выражение для плотности конечных состояний

$$d\rho_f = \int \delta\left(\hbar\omega - I - \frac{p^2}{2m}\right) \frac{V p dp^2 d\Omega}{2(2\pi\hbar)^3} = \frac{V m p}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega \quad (7)$$

и связь вероятности и сечения процесса

$$d\sigma = \frac{d\omega}{j} = \frac{d\omega}{\rho c} = \frac{V d\omega}{c} \quad (8)$$

($\rho = 1/V$ — плотность числа фотонов), находим согласно (4) — (8) дифференциальное сечение фотоэффекта:

$$d\sigma = \frac{32e^2 a^3}{m\omega c} \frac{(\mathbf{e}_{k\sigma}\hat{\mathbf{p}})^2 \hbar^5 p}{[\hbar^2 + a^2(p - \hbar\mathbf{k})^2]^4} d\Omega. \quad (9)$$

Так как $\epsilon_e = pv/2 \approx \hbar kc \ll mc^2$ ($v \ll c$), то $p \gg \hbar k$. Учитывая это обстоятельство и условие $pa \gg \hbar$ в выражении (9) и выполнив в нем усреднение по поляризациям фотона с помощью соотношения

$$\overline{(\mathbf{e}_{k\sigma}\hat{\mathbf{p}})^2} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (\mathbf{e}_{k\sigma})_l (\mathbf{e}_{k\sigma})_n p_l p_n = \frac{1}{2} p_l p_n \left(\delta_{ln} - \frac{k_l k_n}{k^2} \right) = \frac{p^2}{2} \sin^2 \theta,$$

получаем дифференциальное сечение для неполяризованных фотонов

$$d\sigma = \frac{16e^2 \hbar^5 \sin^2 \theta d\Omega}{m\omega c a^5 p^5} = 32Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^2 \left(\frac{I_0}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \sin^2 \theta d\Omega \quad (10)$$

и, соответственно, полное сечение фотоэффекта

$$\sigma = \frac{256\pi}{3} Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^2 \left(\frac{I_0}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \quad (11)$$

($I_0 = I/Z^2 = 13,6$ эВ — потенциал ионизации атома водорода).

Численное значение (11) для $Z = 1$ и $\hbar\omega \approx 5$ кэВ составляет $0,6 \cdot 10^{-25}$ см².

Выражение (11), умноженное на 2 (два K -электрона), можно использовать и для вычисления (приближенного) сечения фотоэффекта на атомах, отличных от водородоподобного (вклад других электронов, находящихся в возбужденных состояниях, меньше, чем K -электронов: возбужденные электроны менее сильно связаны с ядром, а в пределе свободных электронов поглощения ими фотонов не происходит).

14.21. Решение данной задачи может быть получено в результате простых преобразований в решении предыдущей*). Перестановка начального и конечного состояний не меняет значения $|V_{fi}|^2$ (в силу эрмитовости \mathcal{V}). Следует произвести изменения:

а) в выражении для плотности конечных состояний

$$d\rho_f = \frac{V\omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3} \quad (\hbar\omega = \varepsilon_e + I \approx \varepsilon_e);$$

б) в соотношении, связывающем вероятность и сечение:

$$d\sigma = \frac{dw}{j} = \frac{dw}{\rho_e v_e} = \frac{V dw}{v_e};$$

в) заменить усреднение по поляризациям фотона суммированием, что дает дополнительный множитель 2.

В результате указанных преобразований в соответствующих формулах предыдущей задачи, находим дифференциальное и полное сечения рекомбинации электрона на основной уровень водородоподобного атома:

$$d\sigma_{\text{рек}}^{(0)} = 16Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^2 \left(\frac{I_0}{\varepsilon_e}\right)^{1/2} \sin^2\theta d\Omega, \quad (1)$$

$$\sigma_{\text{рек}}^{(0)} = \frac{128\pi}{3} Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^2 \left(\frac{I_0}{\varepsilon_e}\right)^{1/2}. \quad (2)$$

Отметим, что рекомбинация (быстрого) электрона на возбужденные уровни водородоподобного атома имеет значительно меньшие сечения и их учет приводит к полному сечению рекомбинации, отличающемуся от найденного (2) всего на 20%.

14.22. По своей физической природе процесс фоторасщепления дейтрона аналогичен фотоэффекту, и расчет сечения этого процесса полностью дублирует решение задачи 14.20. Соответственно, взяв за образец решение этой задачи, укажем лишь те изменения, которые следует произвести в формулах этого решения, чтобы найти сечение фоторасщепления.

*) Отметим, что согласно принципу детального равновесия сечения взаимно обратных процессов фотоэффекта и радиационной рекомбинации связаны простым соотношением (см. 13.60).

Под в. ф. $\Psi_0(r)$ теперь следует понимать в. ф. дейтрона

$$\Psi_0(r) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \frac{e^{-r/a}}{r}, \quad E_i = \hbar\omega - \varepsilon_0,$$

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} = \frac{\hbar^2}{Ma^2} - \text{энергия связи дейтрона}$$

(M — масса нуклона, $\mu = M/2$ — приведенная масса системы из протона и нейтрона). В выражении (2) следует произвести очевидные замены: $e \rightarrow -e$, $m \rightarrow M$, $r \rightarrow r_p = r/2$.

Вид в. ф. Ψ_f сохраняется, однако теперь $E_f = p^2/2\mu = p^2/M$. Изменения в формулах (5), (6) связаны, по существу, только с изменением вида в. ф. $\Psi_0(r)$. В частности, формулу (6) следует заменить выражением

$$\int e^{-\frac{ipr}{\hbar}} \hat{p} \frac{e^{-r/a}}{r} d^3r = \frac{4\pi a^2 p}{1 + p^2 a^2 / \hbar^2}$$

(при этом, учитывая дипольный характер приближения, мы сразу опустили слагаемое $ikr/2$ в показателе экспоненты).

Плотность конечных состояний имеет вид

$$d\rho_f = \int \delta\left[\hbar\omega - \varepsilon_0 - \frac{p^2}{M}\right] \frac{V d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{VMp d\Omega}{2(2\pi\hbar)^3}, \quad p = \sqrt{M(\hbar\omega - \varepsilon_0)},$$

и, в отличие от 14.20, в дальнейшем мы не будем предполагать выполнения условия $\hbar\omega \gg \varepsilon_0$.

Учитывая сказанное выше, легко приходим к следующему выражению для дифференциального сечения процесса фоторасщепления дейтрона:

$$d\sigma = 2 \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar^2 p (\varepsilon p)^2 d\Omega}{M^3 \omega \left[\frac{\hbar^2}{Ma^2} + \frac{p^2}{M} \right]^2 a} = 2 \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\sqrt{\varepsilon_0} \hbar^2 p (\varepsilon p)^2 d\Omega}{M^{5/2} (\hbar\omega)^3},$$

которое после усреднения по поляризациям фотона принимает вид

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar^2 \sqrt{\varepsilon_0} p^3 \sin^2 \theta}{M^{5/2} (\hbar\omega)^3} d\Omega.$$

Соответственно полное сечение фоторасщепления равно

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar^2 \sqrt{\varepsilon_0} p^3}{M^{5/2} (\hbar\omega)^3} = \frac{8\pi}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar^2 \sqrt{\varepsilon_0} (\hbar\omega - \varepsilon_0)^{3/2}}{M (\hbar\omega)^3}.$$

В заключение отметим, что при решении задачи мы рассматривали нуклоны как бесспиновые частицы. Однако нетрудно сообразить, что учет спина не меняет полученных результатов (естественно, в условиях, когда спиновые состояния протона и нейтрона не фиксируются, т. е. проведено суммирование по поляризациям нуклонов).

14.23. Начальное состояние системы \Rightarrow свободный электрон и вакуум фотонов — описывается в. ф.

$$\Psi_i = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_i \mathbf{r} / \hbar} |0, 0, \dots\rangle, \quad E_i = \frac{p_i^2}{2m}. \quad (1)$$

Под действием возмущения

$$\hat{V} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}) \quad (2)$$

может произойти рассеяние электрона, сопровождающееся излучением одного фотона. В. ф. возможных конечных состояний имеют вид

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_f \mathbf{r} / \hbar} |1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots\rangle, \quad E_f = \frac{p_f^2}{2m} + \hbar\omega. \quad (3)$$

Вероятность рассматриваемого перехода (в единицу времени), происходящего во втором порядке теории возмущений, рассчитывается по общей формуле

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\nu} \frac{V_{fi} V_{\nu i}}{E_i - E_{\nu}} \right|^2 d\rho_f. \quad (4)$$

Отметим, что матричный элемент V_{fi} отличен от нуля уже в первом порядке за счет второго слагаемого в (2); однако он содержит множитель $\delta_{\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f + \hbar\mathbf{k}}$, выражающий закон сохранения импульса при излучении фотона свободным электроном, а комбинирование этого закона с законом сохранения энергии приводит, как хорошо известно, к невозможности излучения фотона свободным электроном; поэтому взаимодействие электрона с внешним полем, описываемое первым слагаемым в (2) и приводящее к передаче импульса ядру, является существенным элементом рассматриваемого процесса; последнее слагаемое в (2) ($\sim e^2$) во втором порядке не дает вклада в амплитуду процесса.

Промежуточные состояния ν в (4), дающие отличный от нуля вклад, описываются в. ф. двух типов:

$$\begin{aligned} \Psi_{\nu_1} &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{x}\mathbf{r}} |1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \dots\rangle, \quad E_{\nu_1} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} + \hbar\omega, \\ \Psi_{\nu_2} &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{x}\mathbf{r}} |0, 0, \dots\rangle, \quad E_{\nu_2} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}; \end{aligned} \quad (5)$$

при этом суммирование по $\nu_{1,2}$ сводится к сумме по всем возможным волновым векторам \mathbf{x} электрона в промежуточном состоянии.

Учитывая явный вид в. ф. и оператора $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ (см. 14.1), найдем матричные элементы, входящие в выражение (4):

$$\begin{aligned}
 (\hat{V})_{v_1 i} &= \frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{v_1 i} = \frac{e}{mV} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} \mathbf{e}_{k\sigma} \int e^{-i(\kappa+k)\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} dV = \\
 &= \frac{e\hbar}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} (\mathbf{e}_{k\sigma}\mathbf{k}_1) \delta_{\mathbf{k}_1, \kappa+k}, \\
 (\hat{V})_{v_2 i} &= -Ze^2 \left(\frac{1}{r}\right)_{v_2 i} = -\frac{Ze^2}{V} \int \frac{1}{r} e^{i(\mathbf{k}_1-\kappa)\mathbf{r}} dV = -\frac{4\pi Ze^2}{V(\mathbf{k}_1-\kappa)^2}, \\
 (\hat{V})_{f v_1} &= -Ze^2 \left(\frac{1}{r}\right)_{f v_1} = -\frac{Ze^2}{V} \int \frac{1}{r} e^{i(\kappa-\mathbf{k}_2)\mathbf{r}} dV = -\frac{4\pi Ze^2}{V(\kappa-\mathbf{k}_2)^2}, \\
 (\hat{V})_{f v_2} &= \frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{f v_2} = \frac{e}{mV} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} \mathbf{e}_{k\sigma} \int e^{-i(\mathbf{k}_2+k)\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} e^{i\kappa\mathbf{r}} dV = \\
 &= \frac{e\hbar}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} (\mathbf{e}_{k\sigma}\kappa) \delta_{\kappa, \mathbf{k}_2+k} \quad (\mathbf{p}_{1,2} = \hbar\mathbf{k}_{1,2}).
 \end{aligned} \tag{6}$$

Наличие в матричных элементах множителей вида $\delta_{\mathbf{k}_1, \kappa+k}$ позволяет легко выполнить суммирование по промежуточным состояниям (в сумме по состояниям типа v_1 отлично от нуля лишь одно слагаемое с $\kappa = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}$, в случае состояний типа v_2 — лишь с $\kappa = \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}$):

$$\begin{aligned}
 \sum_v' \frac{V_{fv} V_{vi}}{E_i - E_v} &= -\frac{4\pi Ze^2}{q^2} \frac{e\hbar}{mV} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} \times \\
 &\times \left\{ \frac{\mathbf{e}_{k\sigma}\mathbf{k}_1}{\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})^2}{2m} - \hbar\omega} + \frac{\mathbf{e}_{k\sigma}\mathbf{k}_2}{\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{k}_2)^2}{2m}} \right\} \tag{7}
 \end{aligned}$$

($\hbar\mathbf{q} = \hbar(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k})$ — импульс, передаваемый ядру).

Плотность конечных состояний равна

$$\begin{aligned}
 d\rho_f &= \int \delta(E_f - E_i) \frac{V d^3 k_2}{(2\pi)^3} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} = \\
 &= \int \delta\left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}\right) \frac{V^2 \omega^2 m k_2}{(2\pi)^6 \hbar^2 c^3} d\Omega_\nu d\Omega_2 d\omega d\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = \\
 &= \frac{mV^2 \omega^2 k_2}{(2\pi)^6 \hbar^2 c^3} d\Omega_\nu d\Omega_2 d\omega \quad \left(k_2 = \sqrt{k_1^2 - \frac{2m\omega}{\hbar}}\right). \tag{8}
 \end{aligned}$$

С помощью (4), (7), (8) и выражения, связывающего вероятность и сечение процесса:

$$d\sigma = \frac{d\omega}{j} = \frac{d\omega}{\rho v_1} = \frac{mV d\omega}{\hbar k_1},$$

находим дифференциальное сечение тормозного излучения:

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{(Ze^2)^2}{\pi^2 q^4} \frac{\omega k_2}{k_1 c^2} \times \left| \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{k}_1}{\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})^2}{2m} - \hbar\omega} + \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{k}_2}{\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{k}_2)^2}{2m}} \right|^2 d\Omega_\gamma d\Omega_2 d\omega. \quad (9)$$

Так как электрон нерелятивистский и $\hbar\omega \ll mc^2$, то

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})^2}{2m} - \hbar\omega = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}}{m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \hbar\omega \approx -\hbar\omega. \quad (10)$$

Действительно,

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}}{m} \leq \frac{\hbar^2 k_1 k}{m} = \frac{\hbar\omega v_1}{c} \ll \hbar\omega, \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \omega^2}{2mc^2} = \hbar\omega \frac{\hbar\omega}{2mc^2} \ll \hbar\omega.$$

Аналогично

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{k}_2)^2}{2m} \approx \hbar\omega, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k} \approx \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2. \quad (11)$$

С учетом (10), (11) выражение (9) принимает вид

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(Ze^2)^2 k_2}{\pi^2 q^4 \hbar^2 \omega c^2 k_1} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{q}|^2 d\Omega_\gamma d\Omega_2 d\omega. \quad (12)$$

Формула (12) дает наиболее полную информацию о процессе тормозного излучения. Ограничиваясь же рассмотрением лишь спектрального состава тормозного излучения, сделаем следующие преобразования.

Не интересуясь поляризацией излучаемых фотонов, выполним в (12) суммирование по их двум независимым поляризациям с помощью соотношения

$$\sum_{\sigma} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{q})^2 = \sum_{\sigma} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_n q_i q_n = q_i q_n \left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2} \right).$$

При этом

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(Ze^2)^2 k_2 \left(q^2 - \frac{(\mathbf{q}\mathbf{k})^2}{k^2} \right)}{\pi^2 q^4 \hbar^2 \omega c^2 k_1} d\Omega_\gamma d\Omega_2 d\omega. \quad (13)$$

Не интересуясь угловым распределением излучаемых фотонов, выполним в (13) интегрирование по направлениям их вылета (оно проводится элементарно, если выбрать полярную ось вдоль вектора \mathbf{q}):

$$d\sigma = \frac{8}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(Ze^2)^2}{\pi q^2} \frac{k_2}{\hbar^2 \omega c^2 k_1} d\Omega_2 d\omega. \quad (14)$$

Выполнив в выражении (14) интегрирование по углам рассеянных электронов, которое проводится элементарно, если выбрать полярную ось вдоль вектора \mathbf{k}_1 (при этом $q^2 = k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 \cos \theta$), находим дифференциальное сечение тормоз-

ного излучения как функцию частоты излучаемых фотонов (т. е. спектральное распределение фотонов):

$$d\sigma = \frac{8}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(Ze^2)^2}{mc^2 \omega E_1} \ln \left[\frac{(\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - \hbar\omega})^2}{\hbar\omega} \right] d\omega \quad (15)$$

(E_1 — энергия падающих электронов). Полное сечение тормозного излучения бесконечно.

Так как при решении задачи действие поля ядра рассматривалось как возмущение, то применимость полученных выражений требует выполнения условия $Ze^2/\hbar v_0 \ll 1$. В частности, полученные результаты несправедливы, когда почти вся энергия падающего электрона передается излучаемому фотону.

Глава 15

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ВОЛНОВЫЕ УРАВНЕНИЯ

15.1. Общее решение уравнения Клейна — Гордона можно представить в виде суперпозиции *)

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) + \Psi^{(-)}(\mathbf{r}, t), \quad \Psi^{(\pm)} = \int d^3k a^{(\pm)}(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

частных решений этого уравнения, образующих полную систему **):

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = e^{\pm i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(k)t)}, \quad \omega(k) = \sqrt{\mathbf{k}^2 c^2 + m^2 c^4 / \hbar^2} > 0. \quad (2)$$

Функция $\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ описывает частицу, имеющую импульс $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и энергию $\varepsilon = \hbar\omega \geq mc^2$. Функция $\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ отвечает формально энергии $\varepsilon' = -\hbar\omega \leq -mc^2$ и импульсу $-\hbar\mathbf{k}$. Такое решение уравнения после выполнения операции зарядового сопряжения представляет в. ф. античастицы, имеющей энергию $\varepsilon = \hbar\omega \geq mc^2$ и импульс $\hbar\mathbf{k}$ (см. 15.2).

Ограничиваясь в выражении (1) суперпозициями $\Psi^{(+)}$, $\Psi^{(-)}$, содержащими только либо функции $\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$, либо $\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ (еще раз подчеркнем, что только такие решения уравнения Клейна — Гордона описывают физически реализуемые состояния свободной бесспиновой частицы!), подставим указанные функции $\Psi^{(\pm)}$ в выражение для Q , приведенное в условии задачи. Элементарное интегрирование с учетом соотношения

$$\int e^{\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d^3r = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$$

*) Следует подчеркнуть, что общее решение (1) уравнения Клейна — Гордона имеет лишь формальный смысл, так как оно не описывает никакого одночастичного состояния. Одночастичные состояния описываются лишь функциями $\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ и $\Psi^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ в отдельности (см. 15.2).

***) Обращаем внимание на используемое обозначение в. ф. $\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}$.

дает

$$Q^{(\pm)} = \pm \frac{(2\pi)^3 \hbar}{mc^2} \int \omega(k) |a^{(\pm)}(\mathbf{k})|^2 d^3k, \quad (3)$$

т. е. $Q^{(\pm)}$ действительно имеет определенный (но разный для функций $\Psi^{(\pm)}$) знак.

Подчеркнем, что, хотя $Q^{(+)}$ и $Q^{(-)}$ имеют вполне определенные знаки, соответствующие подынтегральные выражения $\rho^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$ этим свойством, вообще говоря, не обладают, так что $\rho^{(+)}$, как и $-\rho^{(-)}$, нельзя интерпретировать как плотность вероятности.

В случае заряженных частиц величинам $\rho^{(+)}$, $\rho^{(-)}$ можно дать простую интерпретацию, связав их с объемной плотностью заряда. Для частицы, имеющей заряд e , выражение $e\rho^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ при нормировке $Q^{(+)} = 1$ можно рассматривать как плотность заряда в соответствующем одночастичном состоянии. Величина $e\rho^{(-)}$ представляет плотность заряда в соответствующем состоянии античастицы, при этом нормировка $Q^{(-)} = -1$ автоматически обеспечивает противоположные знаки зарядов частицы и соответствующей ей античастицы.

В случае нейтральных частиц наглядная интерпретация локальных величин $\rho^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$, вообще говоря, невозможна. Однако это обстоятельство не следует рассматривать как порок теории, так как локальные пространственные характеристики для одной частицы в релятивистской области лишены глубокого физического смысла. Это связано с тем, что локализация частицы в малой области пространства требует сильных внешних полей. Но в таких полях становится возможным рождение новых частиц, и задача автоматически перестает быть одночастичной. По этой причине в релятивистских теориях физический смысл в. ф. частицы как амплитуды вероятности сохраняется лишь в импульсном (но не координатном!) представлении.

Величину $\rho^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ можно, впрочем, интерпретировать как плотность вероятности для частицы (и соответственно $-\rho^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ — для античастицы), если усреднить ее по некоторому не слишком малому объему пространства.

15.2. Инвариантность уравнения Клейна — Гордона для свободной частицы

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \Psi(\mathbf{r}, t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

относительно преобразования \hat{C} означает, что если $\Psi(\mathbf{r}, t)$ является решением уравнения (1), то $\Psi_c = \hat{C}\Psi$ также является решением этого уравнения, т. е. Ψ и Ψ_c удовлетворяют одному и тому же уравнению.

Произведя в (1) комплексное сопряжение, очевидным образом убеждаемся в рассматриваемой инвариантности уравнения.

Так как $\hat{C}^2 = 1$, то в соответствии с условием задачи общее решение уравнения Клейна — Гордона можно записать в виде

$$\Psi = \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) + \Psi^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) + \hat{C}\Psi_c^{(+)}(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

(функции $\Psi^{(\pm)}$ определены в предыдущей задаче; отметим, что знаки « \pm » указывают на характер временной зависимости в ф., соответствующей положительным (+) и отрицательным (−) энергиям или частотам). Оно включает в себя в. ф. как частицы $\Psi^{(+)}$, так и античастицы $\Psi_c^{(+)}$ и поэтому не описывает никакого физического одночастичного состояния. Рассматривать же (2) в духе обычного принципа суперпозиции не имеет глубокого смысла, так как в этом соотношении часть решений — описывающая античастицу — подвергается антилинейному преобразованию.

Отметим, что физический смысл преобразования \hat{C} как зарядового сопряжения для бесспиновых частиц проявляется при рассмотрении не свободных, а заряженных частиц, находящихся во внешнем электромагнитном поле, которое по-разному действует на частицы и античастицы (см. 15.3).

Из соотношения $\Psi_c = \hat{C}\Psi \equiv \Psi^*$, очевидно, следует

$$\Psi_{c, e} = \Psi_{-e}, \quad \Psi_{c, p} = \Psi_{-p}, \quad \Psi_{c, m} = \Psi_{-m}, \quad \Psi_{c, t} = \Psi_t.$$

Действительно, если $\Psi \propto \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ — с. ф. оператора \hat{p} , отвечающая с. з. $\hbar\mathbf{k}$, то соответствующая зарядово-сопряженная функция $\Psi_c \propto \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r})$ отвечает с. з. $-\hbar\mathbf{k}$ и т. д.

15.3. а) Уравнение Клейна — Гордона для частицы с зарядом e во внешнем электромагнитном поле

$$\left\{ c^2 \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right)^2 \Psi \quad (1)$$

после выполнения в нем комплексного сопряжения можно записать в виде

$$\left\{ c^2 \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi_c = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\varphi \right)^2 \Psi_c, \quad (2)$$

также представляющем уравнение Клейна — Гордона, но для частицы с зарядом $-e$ и такой же массой m , как в исходном уравнении (1).

б) Совершив в (1) одновременно с преобразованием \hat{C} функции Ψ переход к некоторому новому электромагнитному полю $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}_c$, $\varphi \rightarrow \varphi_c$, приходим к уравнению

$$\left\{ c^2 \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A}_c \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi_c = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\varphi_c \right)^2 \Psi_c,$$

которое при $\mathbf{A}_c = -\mathbf{A}$, $\varphi_c = -\varphi$ имеет такой же вид, как уравнение (1).

в) Рассмотрим постоянное электромагнитное поле (потенциалы \mathbf{A} , φ не зависят от времени). В этом случае уравне-

ние (1) имеет стационарные решения вида $\Psi_{\epsilon} = e^{-i\epsilon t/\hbar} \psi(\mathbf{r})$. Среди этих решений имеются отвечающие как положительным, так и отрицательным значениям энергии ϵ частицы (сравнить со случаем свободной частицы, который получается адиабатическим выключением поля). Решения, отвечающие $\epsilon > 0$, как и в случае свободной частицы, имеют обычный смысл: они описывают возможные состояния частицы (то же самое относится к произвольной суперпозиции $\Psi^{(+)}$ таких частных решений). Решения для $\epsilon < 0$, как и произвольная суперпозиция таких решений $\Psi^{(-)}$, не имеют непосредственного физического смысла, который в этом случае можно приписать $\Psi_c^{(+)} = \hat{C}\Psi^{(-)} \equiv \Psi^{(-)*}$, как в. ф. античастицы. Действительно, $\Psi_c^{(+)}$ имеет правильную временную зависимость и удовлетворяет уравнению Клейна—Гордона (2) для частицы с зарядом $-e$, противоположным заряду той частицы, в. ф. которой является $\Psi^{(+)}$. Таким образом, общее решение уравнения Клейна—Гордона для частицы в электромагнитном поле представляется, как и в случае свободной частицы, в виде

$$\Psi = \Psi^{(+)} + \Psi^{(-)} = \Psi^{(+)} + \hat{C}\Psi_c^{(+)}$$

Данная выше интерпретация преобразования \hat{C} как зарядового сопряжения, осуществляющего переход от частицы к античастице, основана на результате п. а) решения. В этом смысле установленная в п. б) инвариантность уравнения Клейна—Гордона выражает его симметрию относительно замены частицы античастицей: любому состоянию частицы, описываемому в. ф. $\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$, соответствует точно такое же состояние античастицы с в. ф. $\Psi_c^{(+)}(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ (при этом при переходе к античастице у потенциалов внешнего электромагнитного поля следует изменить знак, что согласуется с физическим смыслом зарядового сопряжения).

15.4. Учитывая вид оператора зарядового сопряжения \hat{C} для бесспиновых частиц $\Psi_c = \hat{C}\Psi \equiv \Psi^*$ (см. 15.2 и 15.3) и совершая в уравнении

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4 + 2mc^2 U) \Psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi \quad (1)$$

комплексное сопряжение, получаем точно такое же уравнение для зарядово-сопряженной функции *):

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4 + 2mc^2 U) \Psi_c = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi_c, \quad (2)$$

т. е. уравнение Клейна—Гордона для частицы в скалярном поле инвариантно относительно зарядового сопряжения (отме-

*) $U(\mathbf{r}, t)$ — вещественная функция, что является аналогом вещественности потенциала и эрмитовости гамильтониана в нерелятивистском случае.

тим, что при переходе от (1) к (2) внешнее скалярное поле не изменялось, в отличие от случая электромагнитного поля, в котором для обеспечения зарядовой симметрии требовалось изменить значения потенциалов на противоположные).

Уравнения (1) и (2) имеют одинаковый вид, только первое из них описывает частицу, а второе — античастицу. Поэтому, если в. ф. $\Psi(\mathbf{r}, t)$ описывает некоторое физически реализуемое состояние частицы в поле U , то точно такое же состояние, описываемое в. ф. $\Psi_c \equiv \Psi$, возможно и для античастицы в том же поле, что и доказывает одинаковый характер действия скалярного поля на частицу и соответствующую ей античастицу.

15.5. Внутренняя четность бесспиновой частицы определяется характером преобразования ее в. ф. при отражении координат $P\Psi(\mathbf{r}, t) = \pm\Psi(-\mathbf{r}, t)$ и равна $+1$ и -1 соответственно для скалярной и псевдоскалярной функций.

В. ф. состояний частицы и соответствующей ей античастицы связаны с различными частными решениями уравнения Клейна — Гордона для одной и той же (скалярной или псевдоскалярной) функции $\Psi(\mathbf{r}, t)$, которую можно записать в виде (см. 15.2)

$$\Psi = \Psi^{(+)} + \Psi^{(-)} = \Psi^{(+)} + \hat{C}\Psi_c^{(+)},$$

где $\Psi_c^{(+)} = \hat{C}\Psi^{(-)} \equiv \Psi^{(-)*}$. Функции $\Psi^{(+)}$ и $\Psi_c^{(+)}$ в отдельности описывают состояния частицы и античастицы соответственно.

Функции $\Psi^{(+)}$ и $\Psi^{(-)}$ имеют одинаковый характер по отношению к отражению координат (т. е. обе являются либо скалярными, либо псевдоскалярными); то же самое относится, очевидно, и к функциям $\Psi^{(-)}$ и $\Psi_c^{(+)}$ (комплексное сопряжение не меняет скалярного или псевдоскалярного характера функции). Отсюда вытекает, что функции $\Psi^{(+)}$ и $\Psi_c^{(+)}$ имеют одинаковый характер относительно отражения координат, что и доказывает одинаковое значение внутренних четностей бесспиновой частицы и соответствующей ей античастицы.

Следует подчеркнуть, что в релятивистском случае внутренние четности *бозонов* могут быть, в принципе, определены из закона сохранения четности ввиду возможности процессов рождения и поглощения бозонов поодиночке. В нерелятивистском же случае при взаимодействии частиц число их (каждого вида) не изменяется, и поэтому внутренняя четность системы на всех стадиях процесса одна и та же и не является экспериментально наблюдаемой величиной. Соответственно, невозможно различить характер в. ф. относительно отражения координат и из соображений простоты полагают, что в. ф. является скалярной.

Отметим, что для частиц произвольного спина внутренние четности частицы и античастицы одинаковы для бозонов и противоположны для фермионов.

15.6. В нерелятивистской квантовой механике ортогональность и нормировка с. ф. эрмитова оператора \hat{f} определяются соотношением

$$\int \Psi_{f'}^*(\mathbf{r}) \Psi_f(\mathbf{r}) dV = \delta(f - f') \quad (\text{или } \delta_{f'f} \text{ для д. с.}), \quad (1)$$

вид которого тесно связан с сохранением во времени нормировки в. ф. $\int |\Psi|^2 dV$.

В случае уравнения Клейна — Гордона во времени сохраняется величина

$$Q = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi - \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \right) \Psi \right\} dV, \quad (2)$$

и именно это выражение должно использоваться для нормировки в. ф.

Представим в. ф. $\Psi_{\mathbf{p}, \varepsilon}$ в виде

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = C^{(\pm)}(\mathbf{p}) e^{\pm \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)}, \quad \varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \geq mc^2, \quad (3)$$

где $\Psi_{\mathbf{p}}^{(+)}$ описывает частицу с импульсом \mathbf{p} и энергией ε , а $\Psi_{\mathbf{p}}^{(-)}$ отвечает формально импульсу $-\mathbf{p}$ и энергии $-\varepsilon$ и описывает античастицу с импульсом \mathbf{p} и энергией ε (см. 15.2).

Подставляя в интеграл (2) вместо функций Ψ и Ψ^* соответственно в. ф. $\Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$ и $\Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*}$, легко убеждаемся в том, что он равен нулю в случае различных функций $\Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$ и $\Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)}$ и пропорционален $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$. Это свойство ортогональности — обобщение на релятивистский случай формулы (1). Выбрав в (3) $C^{(\pm)}(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3 \varepsilon(\mathbf{p})}}$, получаем условие ортонормированности системы функций в виде

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} - \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*} \right) \Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} \right\} dV &= \pm \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \\ \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{p}}^{(\mp)} - \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*} \right) \Psi_{\mathbf{p}}^{(\mp)} \right\} dV &= 0. \end{aligned}$$

15.7. Если решение $\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона, описывающее физическое состояние частицы, представить в виде суперпозиции функций (сравнить с решениями задач 15.1 и 15.6)

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} = \sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3 \varepsilon}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)};$$

$$\begin{aligned} \Psi^{(+)} &= \int a^{(+)}(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)}(\mathbf{r}, t) d^3 p = \\ &= \int \sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3 \varepsilon(\mathbf{p})}} a^{(+)}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)} d^3 p, \quad (1) \end{aligned}$$

то сохраняющуюся во времени величину $Q^{(+)}$ можно представить в виде

$$Q^{(+)} = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi^{(+)*} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)} - \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)*} \right) \Psi^{(+)} \right\} dV = \int |a^{(+)}(\mathbf{p})|^2 d^3p. \quad (2)$$

По аналогии с нерелятивистским случаем функцию $a^{(+)}(\mathbf{p})$ (точнее, $a^{(+)}(\mathbf{p}, t) = a^{(+)}(\mathbf{p}) e^{-i\epsilon t/\hbar}$) следует рассматривать как в. ф. состояния частицы в импульсном представлении и использовать значение $Q^{(+)} = 1$ для ее нормировки.

Аналогично можно ввести в. ф. античастицы в импульсном представлении, используя разложение решения $\Psi^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона по функциям $\Psi_{\mathbf{p}}^{(-)} \equiv \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)*}$:

$$\Psi^{(-)} = \int a^{(-)}(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}}^{(-)} d^3p = \int \sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3 \epsilon}} a^{(-)}(\mathbf{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \epsilon t)} d^3p,$$

и связь в. ф. античастицы $\Psi_c^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ с $\Psi^{(-)}$: $\Psi_c^{(+)} = \hat{C}\Psi^{(-)} \equiv \Psi^{(-)*}$ (см. 15.2). Нетрудно сообразить, что в. ф. античастицы в импульсном представлении имеет вид $a_c^{(+)}(\mathbf{p}, t) = a^{(-)*}(\mathbf{p}) e^{-i\epsilon t/\hbar}$, условие ее нормировки $\int |a_c^{(+)}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = 1$ эквивалентно значению $Q^{(-)} = -1$.

Отметим, что связь скалярных (или псевдоскалярных) функций $\Psi^{(+)}$, $\Psi_c^{(+)}$ с в. ф. частицы и античастицы в импульсном представлении отличается от нерелятивистского случая дополнительным множителем $\sqrt{mc^2/\epsilon(p)}$ в разложении $\Psi^{(+)}$, $\Psi_c^{(+)}$ по плоским волнам. Именно это обстоятельство приводит к невозможности интерпретации в релятивистском случае в. ф. в координатном представлении как амплитуды вероятности. Можно было бы думать, что введение функции

$$\tilde{\Psi}^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \int a^{(+)}(\mathbf{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (3)$$

(и аналогично функции $\tilde{\Psi}_c^{(+)}$ для античастицы) как в. ф. частицы в координатном представлении устранило бы эту трудность. Но, хотя такая функция удовлетворяет уравнению Клейна — Гордона и для нее сохраняется во времени интеграл $\int |\tilde{\Psi}^{(+)}|^2 dV$ (точно так же, как и в нерелятивистском случае), все равно интерпретация величины $\tilde{\rho} = |\tilde{\Psi}^{(+)}|^2$ как плотности вероятности встречает серьезные трудности, так как нарушается локальный закон сохранения $\text{div } \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho} = 0$. Более того, введение такой функции для описания состояния частицы вызывает серьезные трудности и с чисто теоретической точки зрения, так как она

не обладает никакими определенными трансформационными свойствами по отношению к преобразованию Лоренца. Действительно, имея в виду результат задачи 1.51 и соотношение $\varepsilon(p) = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$, согласно (1) и (3) находим

$$\tilde{\Psi}^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{-\hbar^2 \Delta + m^2 c^2}{m^2 c^2} \right)^{1/4} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t),$$

т. е. связь $\tilde{\Psi}^{(+)}$ со скалярной функцией $\Psi^{(+)}$ осуществляется с помощью нелокального оператора, не имеющего простых трансформационных свойств относительно преобразования Лоренца.

15.8. Произвольное состояние свободной частицы описывается решением $\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ уравнения Клейна — Гордона, представляющим суперпозицию частных решений, отвечающих положительным энергиям (см. 15.1).

Функцию $\Psi^{(+)}$ можно представить в виде

$$\Psi^{(+)} = \int \sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon(p)}} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad (1)$$

где

$$a^{(+)}(\mathbf{p}, t) = a^{(+)}(\mathbf{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon(p) t} \quad (2)$$

является в. ф. частицы в импульсном представлении в обычном квантовомеханическом смысле (см. 15.7). При нормировке

$$\int |a^{(+)}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3 p = 1 \quad (3)$$

среднее значение энергии частицы представляется в виде

$$\bar{\varepsilon} = \int \varepsilon(p) |a^{(+)}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3 p = \int a^{(+)*}(\mathbf{p}, t) \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) d^3 p. \quad (4)$$

Согласно (1)

$$\sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon(p)}} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) = \int \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \frac{d^3 r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (5)$$

Используя (5), перепишем (4) в виде

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int (p^2 c^2 + m^2 c^4) \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}', t) d^3 p d^3 r' d^3 r = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \times \\ &\quad \times \Psi^{(+)}(\mathbf{r}', t) d^3 p d^3 r' d^3 r \quad (6) \end{aligned}$$

(обратить внимание на порядок расположения сомножителей в последнем интеграле). После выполнения в (6) интегрирования по \mathbf{p} с учетом формулы

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3 p = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

элементарно выполняется интегрирование и по \mathbf{r}' , так что

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{mc^2} \int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) d^3 r. \quad (7)$$

Можно получить и несколько иное, эквивалентное (7), выражение для $\bar{\epsilon}$, если воспользоваться соотношением, вытекающим из (2) и (5):

$$-i \frac{\sqrt{\epsilon}}{\hbar} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) = \frac{\partial a^{(+)}(\mathbf{p}, t)}{\partial t} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} = \frac{1}{\sqrt{mc^2}} \int e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)} \frac{d^3 r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (8)$$

Используя (8) в (4), легко находим

$$\bar{\epsilon} = \frac{\hbar^2}{mc^2} \int \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) \right) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) d^3 r. \quad (9)$$

Полученные выражения (7), (9) для $\bar{\epsilon}$ предполагают нормировку (3), эквивалентную условию

$$\int |a^{(+)}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3 p = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi^{(+)*} \frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^{(+)*}}{\partial t} \Psi^{(+)} \right\} d^3 r = 1.$$

Проведенное рассмотрение непосредственно переносится на случай античастицы, если для описания ее состояния используется зарядово-сопряженная функция $\Psi_c^{(+)}(\mathbf{r}, t)$.

Отметим, что согласно (7), (9) выражение для средней энергии бесспиновой частицы можно записать в виде

$$\bar{\epsilon} = \frac{\hbar^2}{2m} \int \left\{ \frac{\partial \Psi^{(+)*}}{c \partial t} \frac{\partial \Psi^{(+)}}{c \partial t} + (\nabla \Psi^{(+)*}) (\nabla \Psi^{(+)}) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} |\Psi^{(+)}|^2 \right\} d^3 r,$$

аналогичном (с точностью до нормировочного множителя) энергии классического скалярного (псевдоскалярного) поля, удовлетворяющего волновому уравнению

$$\left(-\Delta + \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} + \kappa^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0.$$

Энергия такого поля $E = \int T_{00} d^3 r$, где T_{00} (или T_{44}) — плотность энергии поля, являющаяся компонентой тензора энергии — импульса и имеющая вид

$$T_{00} \propto \left[\frac{\partial \Psi^*}{c \partial t} \frac{\partial \Psi}{c \partial t} + (\nabla \Psi^*) (\nabla \Psi) + \kappa^2 \Psi^* \Psi \right].$$

15.9. Задача решается аналогично предыдущей. Среднее значение импульса определяется выражением

$$\bar{\mathbf{p}} = \int \mathbf{p} |a^{(+)}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3 p = \int a^{(+)*}(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) d^3 p. \quad (1)$$

Используя соотношения (см. формулы (5), (8) задачи 15.8)

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{mc^2}{\epsilon(\mathbf{p})}} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) &= \int \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \frac{d^3 r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \\ -\frac{i}{\hbar} \sqrt{mc^2 \epsilon} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) &= \int e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) \frac{d^3 r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \end{aligned}$$

выражение (1) легко привести к виду

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{p}} &= \frac{i\hbar}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) \mathbf{p} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}', t) d^3p d^3r' d^3r = \\ &= \frac{\hbar^2}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}', t) d^3p d^3r' d^3r. \end{aligned} \quad (2)$$

В (2) элементарно выполняется интегрирование сначала по \mathbf{p} (оно дает множитель, пропорциональный $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$), а затем по \mathbf{r}' , и получается искомое выражение:

$$\bar{\mathbf{p}} = \frac{\hbar^2}{mc^2} \int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) d^3r. \quad (3)$$

Имея в виду проведенное вычисление, легко сообразить, что выражение (3) можно записать в более симметричной форме:

$$\bar{\mathbf{p}} = -\frac{\hbar^2}{2mc^2} \int \left\{ \frac{\partial \Psi^{(+)*}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^{(+)*}}{\partial t} \frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial \mathbf{r}} \right\} d^3r. \quad (4)$$

Выражение (4) для среднего импульса бесспиновой частицы имеет с точностью до нормировочного множителя такой же вид, как импульс классического скалярного поля (сравнить с аналогичным замечанием относительно энергии в предыдущей задаче). Компоненты импульса поля определяются выражением $P_i = \int T_{i0} d^3r$, где T_{i0} (или T_{i4}) — плотность импульса поля, являющаяся компонентами тензора энергии-импульса поля, причем $T_{i0} \propto -\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x_i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i}\right)$.

15.10. Задача решается аналогично двум предыдущим. Исходя из соотношения

$$\bar{\mathbf{I}} = \int a^{(+)*} \hat{\mathbf{I}} a^{(+)} d^3p = -i \int a^{(+)*}(\mathbf{p}, t) [\mathbf{p} \nabla_{\mathbf{p}}] a^{(+)}(\mathbf{p}, t) d^3p$$

и используя преобразования, подобные описанным в решениях указанных задач, можно получить искомое выражение:

$$\bar{\mathbf{I}} = \frac{\hbar}{mc^2} \int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) \left[\mathbf{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) d^3r,$$

или в более симметричной форме:

$$\bar{\mathbf{I}} = -\frac{\hbar}{2mc^2} \int \left[\mathbf{r}, \left\{ \frac{\partial \Psi^{(+)*}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^{(+)*}}{\partial t} \frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial \mathbf{r}} \right\} \right] d^3r,$$

в которой оно имеет вид момента \mathbf{L} классического скалярного поля (сравнить с аналогичными замечаниями в отношении энергии и импульса в предыдущих задачах). При этом выражение для плотности момента λ поля имеет наглядный физический смысл, так как его можно представить в виде

$$\lambda(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\hbar} [\mathbf{r}\boldsymbol{\pi}],$$

где $\pi(\mathbf{r}, t)$ — плотность импульса поля (см. предыдущую задачу).

15.11. Уровни энергии и соответствующие в. ф. стационарных состояний определяются из решения стационарного уравнения Клейна — Гордона для частицы в магнитном поле

$$\left\{ c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi = \epsilon^2 \Psi \quad (1)$$

(e — заряд частицы, $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}$). Это уравнение отличается лишь заменой E на $(\epsilon^2 - m^2 c^4)/2mc^2$ от нерелятивистского у. Ш.

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi = E \Psi. \quad (2)$$

Используя известный результат решения уравнения (2) для однородного магнитного поля (см. 6.4 и 6.6, где оно было решено при различных калибровках векторного потенциала), находим

$$\begin{aligned} \epsilon_{p_z n}^2 &= m^2 c^4 + p_z^2 c^2 + 2mc^2 \hbar \omega (n + 1/2), \\ n &= 0, 1, \dots, \quad \omega = \frac{|e| \hbar \mathcal{H}_0}{mc} > 0, \end{aligned}$$

откуда

$$\epsilon_{p_z n} = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p_z^2 c^2 + 2mc^2 \hbar \omega (n + 1/2)}. \quad (3)$$

Интерпретация двух значений $\epsilon_{p_z n}$, отличающихся знаком, точно такая же, как и в случае свободной частицы. Одно из них, $\epsilon_{p_z n} > mc^2$, представляет уровни энергии частицы (заряд которой e), а другое, $\epsilon_{p_z n} < -mc^2$, соответствует античастице (заряд ее $-e$), причем энергия античастицы равна $(-\epsilon) > mc^2$; соответственно энергетические спектры частицы и античастицы — одинаковые (это обстоятельство очевидно заранее, так как выражение (3) не зависит от знака e , а то, какую из двух частиц, с зарядом $+e$ или $-e$, считать частицей, а какую — античастицей, — вопрос договоренности).

Из формулы (3) следует, как и в нерелятивистском случае, что энергетический спектр поперечного движения — дискретный; однако расстояние между соседними уровнями теперь зависит от величины продольной составляющей импульса и уровни не являются эквидистантными.

15.12. Уровни энергии и соответствующие им в. ф. стационарных состояний определяются из решения уравнения

$$[-\hbar^2 c^2 \Delta + 2mc^2 U(r)] \Psi = (\epsilon^2 - m^2 c^4) \Psi, \quad (1)$$

имеющего вид обычного у. Ш., в котором энергия E заменена на $(\epsilon^2 - m^2 c^4)/2mc^2$.

Для состояний с моментом $l = 0$ в. ф. является сферически симметричной. Сделав замену функции $R(r) = r\Psi(r)$, преоб-

разуем уравнение (1) к виду

$$-\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} U(r) R = \frac{\varepsilon^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} R. \quad (2)$$

Решение уравнения (2) для рассматриваемого поля $U(r)$ при $(\varepsilon^2 - m^2 c^4) < 0$ имеет вид ($R(0) = 0$)

$$R(r) = \begin{cases} A \sin \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - \kappa^2} r, & r < a, \\ B e^{-\kappa r}, & r > a, \end{cases}$$

где

$$\kappa = \sqrt{(m^2 c^4 - \varepsilon^2)/\hbar^2 c^2} > 0 \quad (3)$$

(в области энергий $\varepsilon^2 > m^2 c^4$ спектр непрерывный, и в соответствующих стационарных состояниях частица не локализована в ограниченной области пространства).

Требование непрерывности функции R и ее производной в точке $r = a$ приводит к трансцендентному уравнению

$$\operatorname{tg} \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - \kappa_n^2 a^2} = -\frac{1}{\kappa_n a} \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - \kappa_n^2 a^2}, \quad (4)$$

определяющему энергетический спектр связанных s -состояний.

Основные особенности спектра легко понять, имея в виду непосредственную связь рассматриваемой задачи с задачей об уровнях д. с. нерелятивистской частицы в сферической прямоугольной потенциальной яме:

1) в достаточно мелкой яме состояний д. с. нет, они появляются лишь при выполнении условия $U_0 a^2 > \pi^2 \hbar^2 / 8m$;

2) при дальнейшем углублении ямы (увеличении параметра $U_0 a^2$) будут появляться новые уровни д. с., а для уже существующих уровней значение величины $(m^2 c^4 - \varepsilon_n^2)$ при этом будет увеличиваться (это соответствует увеличению $|E_n|$ при углублении ямы в нерелятивистском случае), т. е. ε_n^2 уменьшается при углублении ямы;

3) при некотором критическом значении параметров ямы энергия (точнее, ε_0^2) нижнего уровня достигает значения $\varepsilon_0^2 = 0$ положив в (3), (4) $\varepsilon_{n=0}^2 = 0$, получаем уравнение, определяющее критические параметры:

$$\operatorname{tg} \left\{ \frac{mca}{\hbar} \sqrt{\frac{2U_{0 \text{ кр}}}{mc^2} - 1} \right\} = -\sqrt{\frac{2U_{0 \text{ кр}}}{mc^2} - 1}. \quad (5)$$

Из (5) следует, что значение $U_{0 \text{ кр}}$ зависит от ширины ямы a , но во всяком случае $U_{0 \text{ кр}} > mc^2/2$; в предельных случаях:

$$\begin{aligned} \text{а)} \quad U_{0 \text{ кр}} &\approx \frac{mc^2}{2} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, & a &\gg \hbar/mc, \\ \text{б)} \quad U_{0 \text{ кр}} &\approx mc^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m^2 a^2 c^2} \gg mc^2, & a &\ll \hbar/mc \end{aligned} \quad (6)$$

(выражения (6) определяют наименьший корень $U_{0\text{кр}}$ уравнения (5), другие корни уравнения отвечают обращению в нуль ϵ_n^2 с $n \geq 1$).

Если параметры ямы превышают критические значения, то формальное решение уравнения (4) дает, очевидно, $\epsilon_0^2 < 0$, т. е. энергия ϵ_0 становится мнимой величиной, что свидетельствует о появлении неустойчивости в самой постановке задачи.

Для понимания причины появления такой неустойчивости необходимо иметь в виду следующее обстоятельство. Решение задачи позволяет найти величину ϵ_n^2 , так что $\epsilon_n = \pm \sqrt{\epsilon_n^2}$. Получающиеся два значения энергии, различающиеся знаком, следует интерпретировать так же, как и в случае свободной частицы: одно из них, $\epsilon_n > 0$, дает уровни энергии частицы, другое, $\epsilon_n < 0$, отвечает античастице, энергия которой равна $-\epsilon_n > 0$. Действительно, при уменьшении глубины ямы все уровни $\epsilon_n > 0$ идут вверх и переходят в континуум $\epsilon \geq mc^2$, а уровни $\epsilon_n < 0$ сливаются с континуумом $\epsilon < -mc^2$. Соответственно энергетический спектр частицы и античастицы во внешнем скалярном поле одинаков, т. е. поле действует на них одинаково (в отличие, например, от электростатического; сравнить с 15.4).

Для критических значений параметров ямы энергия основного состояния частицы и античастицы в яме принимает значение $\epsilon_0 = 0$. При этом оказывается возможным спонтанное рождение пар «частица + античастица» (или одиночных частиц, если они истинно нейтральные), и это обстоятельство является причиной возникновения отмеченной выше неустойчивости решения одночастичной задачи.

Таким образом, в релятивистской области в случае достаточно сильных полей постановка одночастичной задачи теряет физический смысл. Аналогичная ситуация возникает и в случае не слишком сильных полей, если они являются быстропеременными во времени, так что существенно отличны от нуля фурье-компоненты «потенциала» $U(\omega)$, отвечающие частотам $\omega \geq mc^2/\hbar$. Формально неприменимость одночастичного подхода в этом случае связана с невозможностью «разбиения» решений волнового уравнения на независимые положительно- и отрицательно-частотные части (из-за переходов между ними), являющегося существенным элементом в интерпретации решений волнового уравнения, сопоставляемых состояниям одной частицы.

15.13. Уровни энергии и соответствующие им в. ф. стационарных состояний определяются из решения уравнения Клейна — Гордона

$$\{-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4\} \Psi = \left(\epsilon + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 \Psi. \quad (1)$$

Учитывая сферическую симметрию задачи, решение уравнения ищем в виде $\Psi(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Из (1) следует

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 [(l + 1/2)^2 - 1/4]}{2mr^2} - \frac{Ze^2e}{mc^2 r} - \frac{Z^2 e^4}{2mc^2 r^2} \right\} R = \frac{e^2 - m^2 c^4}{2mc^2} R. \quad (2)$$

Уравнение (2) имеет форму, аналогичную у. Ш. для радиальной в. ф. \tilde{R} стационарного состояния ($\Psi_{n_r l m} = \tilde{R}_{n_r l} Y_{lm}$) водородоподобного атома в нерелятивистской теории:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 [(l + 1/2)^2 - 1/4]}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right\} \tilde{R}_{n_r l} = E_{n_r l} \tilde{R}_{n_r l},$$

и получается из него с помощью формальных замен ($\alpha = e^2/\hbar c$)

$$Z \rightarrow \frac{Ze}{mc^2}, \quad (l + 1/2)^2 \rightarrow (l + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2, \quad E_{n_r l} \rightarrow \frac{e^2 - m^2 c^4}{2mc^2}. \quad (3)$$

Воспользовавшись известным выражением для энергетических уровней нерелятивистского водородоподобного атома

$$E_{n_r l} \equiv E_n = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 (n_r + 1/2 + l + 1/2)^2} \quad (4)$$

и произведя в нем замены (3), находим

$$(e^2 - m^2 c^4) [n_r + 1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2}]^2 = -Z^2 \alpha^2 e^2,$$

откуда

$$\varepsilon_{n_r l} = mc^2 \left\{ 1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{Z^2 \alpha^2 + [n_r + 1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2}]^2} \right\}^{1/2} \quad (5)$$

(формально в (5) следовало бы в правой части поставить два знака: \pm ; однако при выборе знака «—» получаются «лишние» уровни, для которых физически приемлемого решения уравнения (1) не существует; причина: формула (4) при замене Z на $-Z$ сохраняет свой вид, но она при этом не описывает спектра, так как потенциал становится отталкивательным и состояния д. с. отсутствуют; точно так же кулоновский потенциал в (2) при $e < 0$ является отталкивательным).

При $Z\alpha \ll 1$ из (5) следует

$$E_{n_r l} \equiv \varepsilon_{n_r l} - mc^2 \approx -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2} - Z\alpha \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2 n^3} \left(\frac{1}{2l+1} - \frac{3}{8n} \right). \quad (6)$$

Второе слагаемое в (6) представляет релятивистскую поправку к результату нерелятивистской теории. Как видно, учет релятивистских эффектов снимает «случайное» вырождение уровней в кулоновском поле.

При $Z\alpha > 1/2$ формула (5) приводит к комплексным значениям энергии (сначала для s -состояний, а затем и для больших значений l), что указывает на появление неустойчивости в рас-

смагриваемой задаче. Ее причину легко понять, если заметить, что слагаемое $-Z^2 e^4 / 2mc^2 r^2$ в уравнении (2) на языке нерелятивистской теории можно рассматривать как часть потенциальной энергии, имеющую характер притяжения. При $Z\alpha > 1/2$ это притяжение является настолько сильным, что возникает падение на центр (см. [3]). Соответственно при учете конечности размеров ядра этой неустойчивости, связанной с падением на центр, не возникает *).

15.14. Представив в. ф. $\tilde{\Psi}(r, t)$, удовлетворяющую уравнению Клейна — Гордона, в виде $\tilde{\Psi} = \exp\left(-\frac{imc^2 t}{\hbar}\right) \Psi$, запишем его следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi - \frac{\hbar^2}{2mc^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi. \quad (1)$$

Выделение в в. ф. экспоненциального сомножителя соответствует представлению энергии частицы в виде $\epsilon = mc^2 + E$. Для стационарных состояний

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_E}{\partial t} = E \Psi_E, \quad \frac{\hbar^2}{2mc^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi_E = -\frac{E^2}{2mc^2} \Psi_E.$$

Так как общее решение представляет суперпозицию в. ф. Ψ_E , а для нерелятивистских частиц $E \ll mc^2$, то второе слагаемое в правой части уравнения (1) мало по сравнению с первым (во избежание недоразумений подчеркнем, что рассматриваемое решение уравнения Клейна — Гордона представляет суперпозицию частных решений, отвечающих $\epsilon \geq mc^2$). Пренебрегая этим малым слагаемым, в «нулевом» приближении приходим к у. Ш. для свободной частицы

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi_0 = i\hbar \frac{\partial \Psi_0}{\partial t}. \quad (2)$$

Для определения релятивистской поправки к уравнению (2) представим в. ф. Ψ в (1) в виде $\Psi = \Psi_0 + \Psi_1$, где $|\Psi_1| \ll |\Psi_0|$, и запишем уравнение (1) следующим образом:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} (\Psi_0 + \Psi_1) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi_0 + \Psi_1) = -\frac{\hbar^2}{2mc^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\Psi_0 + \Psi_1). \quad (3)$$

Правую часть этого уравнения с требуемой точностью можно преобразовать к виду

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} (\Psi_0 + \Psi_1) \approx \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi_0 = -\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right)^2 \Psi_0 \approx -\frac{1}{4m^2 \hbar^2} \hat{p}^4 (\Psi_0 + \Psi_1),$$

*) Однако даже в случае ядра конечного радиуса R дальнейшее увеличение его заряда приводит при некотором значении $Z_{кр}$ (зависящем от радиуса R) к появлению новой неустойчивости в рассматриваемой системе, физическая причина которой аналогична обсуждавшейся в предыдущей задаче: в достаточно сильном электростатическом поле (как и в скалярном поле) становится энергетически возможным спонтанное рождение пар «частица + античастица», так что одночастичная задача теряет физический смысл.

с учетом чего уравнение (3) принимает вид

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}\right)\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi. \quad (4)$$

Уравнение (4) имеет форму у. Ш. с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m - \hat{\mathbf{p}}^4/8m^3c^2$, представляющим естественное квантовомеханическое обобщение формулы $H = \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 \approx \mathbf{p}^2/2m - \mathbf{p}^4/8m^3c^2$ классической теории.

15.15. Стационарное уравнение Клейна—Гордона

$$\left[c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 + m^2c^4\right]\Psi = (\epsilon - e\varphi)^2 \Psi$$

в случае $|e\varphi| \ll mc^2$ и $|E| \ll mc^2$ ($\epsilon = mc^2 + E$) удобно записать в виде

$$\left[\frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2}{2m} + e\varphi - E\right]\Psi = \frac{(E - e\varphi)^2}{2mc^2} \Psi, \quad (1)$$

где правая часть много меньше каждого из слагаемых левой части. Пренебрегая правой частью, получаем в «нулевом» приближении у. Ш. нерелятивистской теории.

Для нахождения релятивистской поправки к у. Ш. представим в. ф. в (1) в виде $\Psi = \Psi_0 + \Psi_1$, где Ψ_0 — решение у. Ш., а Ψ_1 описывает изменение этого решения за счет релятивистских эффектов, так что $|\Psi_1| \ll |\Psi_0|$. При этом правую часть уравнения (1) с требуемой точностью можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \frac{(E - e\varphi)^2}{2mc^2} (\Psi_0 + \Psi_1) &\approx \frac{(E - e\varphi)^2}{2mc^2} \Psi_0 = \\ &= \frac{1}{2mc^2} \left[\frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2}{2m} \right]^2 \Psi_0 \approx \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^4}{8m^3c^2} (\Psi_0 + \Psi_1), \end{aligned}$$

с учетом чего уравнение (1) принимает вид

$$\left\{ \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2}{2m} - \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^4}{8m^3c^2} + e\varphi \right\} \Psi = E\Psi,$$

т. е. представляет уравнение на с. ф. и с. з. гамильтониана H , являющегося естественным квантовомеханическим обобщением выражения

$$\begin{aligned} H &= \sqrt{\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 c^2 + m^2c^4} + e\varphi - mc^2 \approx \\ &\approx \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2}{2m} - \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^4}{8m^3c^2} + e\varphi \end{aligned}$$

классической теории.

15.16. Ограничимся, для наглядности рассмотрения, случаем, когда энергия частицы близка к энергии покоя, т. е. $\varepsilon = mc^2 + E$, где $|E| \ll mc^2$. Стационарное уравнение Клейна — Гордона

$$\{-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4\} \Psi = (\varepsilon - e\varphi)^2 \Psi$$

при этом можно записать в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + e\varphi - \frac{(e\varphi)^2}{2mc^2} + \frac{E}{mc^2} e\varphi - \frac{E^2}{2mc^4} \right\} \Psi = E\Psi,$$

аналогичном у. Ш. с эффективной потенциальной энергией

$$U_{\text{эфф}} = e\varphi + \frac{eE}{mc^2} \varphi - \frac{(e\varphi)^2}{2mc^2} - \frac{E^2}{2mc^4} \approx e\varphi - \frac{(e\varphi)^2}{2mc^2}.$$

Если $|e\varphi| > 2mc^2$, то в соответствующей области пространства $U_{\text{эфф}} < 0$, т. е. взаимодействие частицы с полем носит характер притяжения независимо от знака ее заряда.

15.17. Точно так же, как и в нерелятивистском случае, $d\sigma = |f|^2 d\Omega$, где f — амплитуда рассеяния, которая определяется асимптотикой при $r \rightarrow \infty$ решения $\Psi_{\mathbf{p}_0}^{(+)}$ стационарного уравнения Клейна — Гордона

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{Zee_1\varepsilon}{mc^2 r} - \frac{(Zee_1)^2}{2mc^2 r^2} \right\} \Psi_{\mathbf{p}_0}^{(+)} = \frac{p_0^2}{2m} \Psi_{\mathbf{p}_0}^{(+)}, \quad (1)$$

$$\Psi_{\mathbf{p}_0}^{(+)}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} + \frac{f}{r} e^{ikr} \quad (\varepsilon = \sqrt{p_0^2 c^2 + m^2 c^4}).$$

Уравнение записано в виде, имеющем форму у. Ш. с эффективной потенциальной энергией (зависящей от полной энергии ε частицы)

$$U_{\text{эфф}} = \frac{Zee_1\varepsilon}{mc^2 r} - \frac{(Zee_1)^2}{2mc^2 r^2}. \quad (2)$$

Поэтому многие результаты теории рассеяния нерелятивистских частиц непосредственно переносятся и на релятивистский случай. В частности, это относится к расчету амплитуды рассеяния по теории возмущений; в борновском приближении она определяется выражением

$$f_{\text{Б}} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U_{\text{эфф}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r \quad \left(\mathbf{q} = \frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}_0}{\hbar}, \quad q = \frac{2p_0}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2} \right). \quad (3)$$

Некоторую осторожность следует соблюдать при выяснении условий применимости борновского приближения: отмеченная выше аналогия уравнения (1) и у. Ш. предполагает использование в качестве характеристики свободных частиц (при $r \rightarrow \infty$) величины импульса (а не скорости или энергии!). Так что известные условия применимости борновского приближения в

нерелятивистской теории следующим образом обобщаются на релятивистский случай:

$$|U_{\text{эфф}}| \ll \frac{\hbar p}{ma}, \quad |U_{\text{эфф}}| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad (4)$$

Для первого слагаемого в выражении (2) первое из условий (4) требует выполнения неравенства

$$\left| \frac{Zee_1e}{mc^2r} \right| \ll \frac{\hbar p}{mr}, \quad \text{или} \quad \frac{Ze^2}{\hbar c} \ll \frac{v}{c} \leq 1 \quad (v \approx pc^2, |e_1| \sim e) \quad (5)$$

(т. е. теория возмущений неприменима при достаточно больших значениях Z , требуется $Z \ll 137$). Соответственно возможность применения теории возмущений для второго слагаемого в (2) ограничивается вторым неравенством в (4), требующим

$$\frac{(Zee_1)^2}{mc^2r^2} \ll \frac{\hbar^2}{mr^2}, \quad \text{или} \quad \left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 \ll 1. \quad (6)$$

Это — более слабое условие, чем предыдущее (5).

Легко сообразить, что при вычислении амплитуды рассеяния по формулам (2), (3) вторым слагаемым в выражении (2) можно пренебречь. Действительно, как видно из (5), (6), параметром теории возмущений, по которому ведется разложение, является $Z\alpha$. При этом второе слагаемое в (2) вносит вклад в амплитуду рассеяния порядка $(Z\alpha)^2$, т. е. такой же, как и первое слагаемое во втором порядке теории возмущений (последний мы не вычисляем; соответственно учет второго слагаемого — превышение точности!).

Учитывая сказанное и значение интеграла

$$\int \frac{1}{r} e^{-iqr} d^3r = 4\pi/q^2,$$

легко находим амплитуду и дифференциальное сечение рассеяния:

$$f_{\text{в}} = -\frac{2Zee_1e}{\hbar^2c^2q^2}, \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \approx \left(\frac{Zee_1}{2v_0p_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}.$$

15.18. Амплитуда рассеяния заряженной бесспиновой частицы в электростатическом поле $\varphi(r)$ в борновском приближении имеет вид

$$f_{\text{в}} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U_{\text{эфф}} e^{-iqr} d^3r, \quad (1)$$

где

$$U_{\text{эфф}} = \frac{e\varphi}{mc^2} - \frac{(e\varphi(r))^2}{2mc^2} \quad (2)$$

(общие соображения по поводу формул (1), (2) см. в предыдущей задаче).

В ультрарелятивистском случае $\varepsilon \approx pc \rightarrow \infty$ вторым слагаемым в (2) можно пренебречь, при этом

$$f_B \approx -\frac{ep}{2\pi\hbar^2 c} \int \varphi(r) e^{-iqr} d^3r \equiv -\frac{ep}{2\pi\hbar^2 c} \tilde{\varphi}(q).$$

Соответственно

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega = \frac{e^2}{4\pi\hbar^2 c^2} \int_0^{4p^2/\hbar^2} |\tilde{\varphi}(q)|^2 dq^2 \quad (3)$$

(напомним, что $d\Omega = -2\pi d \cos \theta = \frac{\pi\hbar^2}{p^2} dq^2$).

При $p \rightarrow \infty$ верхний предел интеграла в (3) можно положить равным бесконечности (интеграл — сходящийся), и сечение рассеяния $\sigma(\varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow \infty$ является постоянной величиной (в нерелятивистской теории $\sigma \propto E^{-1} \rightarrow 0$ при $E \rightarrow \infty$; см. 13.9).

Применимость борновского приближения в рассматриваемой задаче определяется первым из выражений (4) предыдущей задачи и требует выполнения неравенства $|e\varphi_0| \ll \hbar c/a$ (φ_0, a — характерные величина и радиус действия потенциала).

Отметим, что для справедливости полученного результата требуется, чтобы потенциал при $r \rightarrow \infty$ убывал быстрее, чем r^{-2} ; в противном случае сечение рассеяния равно бесконечности, как и в нерелятивистской теории, из-за расходимости интеграла в выражении (3) на нижнем пределе.

15.19. Стационарное волновое уравнение для релятивистской бесспиновой частицы во внешнем постоянном скалярном поле можно записать в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right\} \Psi = \frac{p_0^2}{2m} \Psi \quad (c^2 p_0^2 = \varepsilon^2 - m^2 c^4),$$

тождественном нерелятивистскому у. Ш.

Так как интерпретация в. ф. свободной частицы в виде плоской волны в релятивистской и нерелятивистской теориях одинакова, то общий подход к задаче рассеяния в нерелятивистской теории, основанный на решении стационарного волнового уравнения, имеющего требуемую асимптотику на больших расстояниях («плоская + расходящаяся волны»), непосредственно переносится на рассматриваемый релятивистский случай. Амплитуда рассеяния в борновском приближении определяется таким же выражением, как и в нерелятивистском случае:

$$f_B(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) e^{-iqr} dV \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}(q).$$

Соответственно сечение рассеяния (сравнить с 13.6)

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{m^2}{4\pi\hbar^2 p_0^2} \int_0^{4p_0^2/\hbar^2} |\tilde{U}(q)|^2 dq^2$$

при $\varepsilon \rightarrow \infty$ определяется выражением ($p_0 \approx \varepsilon/c$)

$$\sigma(\varepsilon) \approx \frac{m^2 c^2}{4\pi \hbar^2 \varepsilon^2} \int_0^\infty |\tilde{U}(q)|^2 dq^2 \propto \frac{1}{\varepsilon^2}.$$

Условие применимости борновского приближения: $|U_0| \ll \ll \hbar p_0 / ma$, где U_0 , a — характерные величины «потенциала» и его радиуса.

15.20. Гамильтониан частицы $\hat{H} = c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\hat{\beta}$.

При нахождении коммутаторов полезно иметь в виду результат задачи 1.9 и то обстоятельство, что два оператора, один из которых (\hat{p} , \hat{l} и т. д.) действует на пространственные переменные, а другой ($\hat{\alpha}$, $\hat{\Sigma}$ и т. д.) — на спиновые, коммутируют друг с другом.

- 1) $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$;
- 2) $[\hat{l}_i, \hat{H}] = [\hat{l}_i, c\hat{\alpha}\hat{p}] = c\alpha_k [\hat{l}_i, \hat{p}_k] = ic\varepsilon_{ikl}\alpha_k \hat{p}_l \neq 0$;
- 3) $[\hat{j}^2, \hat{H}] = [\hat{l}_i \hat{l}_i, \hat{H}] = \hat{l}_i [\hat{l}_i, \hat{H}] + [\hat{l}_i, \hat{H}] \hat{l}_i =$
 $= ic\varepsilon_{ikl}\alpha_k (\hat{l}_i \hat{p}_l + \hat{p}_l \hat{l}_i) \neq 0$;
- 4) так как $[\Sigma_i, \alpha_k] = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} =$
 $= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \sigma_k - \sigma_k \sigma_i \\ \sigma_i \sigma_k - \sigma_k \sigma_i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2i\varepsilon_{ikl}\sigma_l \\ 2i\varepsilon_{ikl}\sigma_l & 0 \end{pmatrix} = 2i\varepsilon_{ikl}\alpha_l$,
 $[\Sigma_i, \beta] = 0$, то $[\hat{s}_i, \hat{H}] = \frac{c}{2} [\Sigma_i, \alpha_k] \hat{p}_k = ic\varepsilon_{ikl}\alpha_l \hat{p}_k = -ic\varepsilon_{ikl}\alpha_k \hat{p}_l$;
- 5) $\hat{\Sigma}^2 = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & \sigma^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = 3$,

поэтому $\hat{s}^2 = 1/4 \hat{\Sigma}^2 = 3/4$ и, очевидно, коммутирует с \hat{H} .

Используя коммутаторы 1), 2), 4), легко находим коммутаторы 6), 7), 8):

- 6) $[\hat{j}_i, \hat{H}] = 0$; 7) $[\hat{j}^2, \hat{H}] = [\hat{j}_i \hat{j}_i, \hat{H}] = 0$;
- 8) $[\hat{\Sigma}\hat{p}, \hat{H}] = [\Sigma_i, \hat{H}] \hat{p}_i + \Sigma_i [\hat{p}_i, \hat{H}] = 2ic\varepsilon_{ikl}\alpha_l \hat{p}_k \hat{p}_i = 0$.
- 9) Так как $\hat{l}\hat{p} = -\hat{p}\hat{l}$, то $[\hat{l}, \hat{H}] = [\hat{l}, c\hat{\alpha}\hat{p}] = -2c\hat{\alpha}\hat{l} \neq 0$;
- 10) $[\hat{P}, mc^2\hat{\beta}] = 0$, $[\hat{P}, \hat{H}] = [\hat{\beta}\hat{l}, c\hat{\alpha}\hat{p}] = c\hat{\beta}\hat{l}\hat{\alpha}\hat{p} - c\hat{\alpha}\hat{p}\hat{\beta}\hat{l} = 0$;
- 11) $[\gamma_5, \hat{H}] = 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$, и для частицы с массой $m = 0$ этот коммутатор равен нулю.

В нерелятивистском случае первые девять операторов коммутируют с гамильтонианом свободной частицы $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ (десятый оператор — обобщение оператора отражения на релятивистский случай частицы со спином $s = 1/2$).

Коммутативность оператора $\hat{\mathbf{p}}$ с \hat{H} является отражением свойства однородности пространства, так же как коммутативность $\hat{\mathbf{j}}$ с \hat{H} — следствие его изотропии. В отдельности операторы $\hat{\mathbf{s}}$ и $\hat{\mathbf{l}}$ не коммутируют с \hat{H} . Это означает, что в релятивистском случае имеется некоторая корреляция между возможным спиновым состоянием частицы и ее орбитальным движением. Коммутативность \hat{P} с \hat{H} — проявление неразличимости «правого» и «левого» в пространстве.

15.21. Ввиду коммутативности гамильтониана $\hat{H} = (c\hat{\alpha}\hat{\mathbf{p}} + mc^2\hat{\beta})$ с $\hat{\mathbf{p}}$ существуют состояния, в которых энергия и импульс частицы одновременно имеют определенные значения. В. ф. таких состояний:

$$\Psi_{\mathbf{p}, \epsilon}(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{p}, \epsilon) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \epsilon t)\right]. \quad (1)$$

Стационарное уравнение Дирака имеет вид

$$(c\hat{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\hat{\beta})u(\mathbf{p}, \epsilon) = \epsilon u(\mathbf{p}, \epsilon)$$

или для двухкомпонентных спиноров

$$\begin{cases} c\sigma\mathbf{p}\chi + mc^2\varphi = \epsilon\varphi, \\ c\sigma\mathbf{p}\varphi - mc^2\chi = \epsilon\chi, \end{cases} \quad u(\mathbf{p}, \epsilon) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Второе из уравнений (2) дает

$$\chi = \frac{c}{\epsilon + mc^2} \sigma\mathbf{p}\varphi, \quad (3)$$

а из первого с учетом (3) и равенства $(\sigma\mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2$ следует

$$\frac{\epsilon - mc^2}{\epsilon + mc^2} \varphi = (\epsilon - mc^2) \varphi,$$

откуда $\epsilon^2 - m^2c^4 = \mathbf{p}^2c^2$, $\epsilon = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}$ (в противном случае существует только тривиальное решение $\chi = \varphi \equiv 0$). При этом спинор φ остается неопределенным и может быть выбран произвольным образом (причем двумя независимыми способами для каждого из двух значений ϵ). Соответственно при данном импульсе \mathbf{p} существуют четыре независимых решения уравнения Дирака вида (1), для которых биспиноры $u(\mathbf{p}, \epsilon)$ равны

$$u(\mathbf{p}, \epsilon = E) = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{E + mc^2} \varphi_1 \end{pmatrix}, \quad u(\mathbf{p}, \epsilon = -E) = \begin{pmatrix} \varphi_2 \\ -\frac{c\sigma\mathbf{p}}{E + mc^2} \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где $E = +\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}$ (подчеркнем, что второй из биспиноров (4) отвечает отрицательной энергии частицы).

Как и уравнение Клейна — Гордона, уравнение Дирака имеет решения, отвечающие отрицательной энергии частицы.

Интерпретация таких решений точно такая же, как и в случае уравнения Клейна — Гордона: функция, получающаяся в результате действия оператора зарядового сопряжения на в. ф. частицы с отрицательной энергией, является в. ф. античастицы (см. 15.27).

Для конкретизации вида спинора φ (а с ним и в. ф. (1)) и получения полной системы функций воспользуемся коммутативностью эрмитова оператора $\hat{\Lambda} = \hat{\Sigma}\hat{\mathbf{p}}$ с операторами \hat{H} и $\hat{\mathbf{p}}$. Из уравнения $\hat{\Lambda}\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda} = \Lambda\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda}$, где

$$\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda} = u(\mathbf{p}, \varepsilon, \Lambda) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)}, \quad u(\mathbf{p}, \varepsilon, \Lambda) = \begin{pmatrix} \varphi_{\Lambda} \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi_{\Lambda} \end{pmatrix},$$

следует

$$(\sigma\mathbf{p})\varphi_{\Lambda} = \Lambda\varphi_{\Lambda}, \quad \text{или} \quad \left(\frac{\sigma}{2}\mathbf{n}\right)\varphi_{\Lambda} = \lambda\varphi_{\Lambda}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}, \quad \Lambda = 2\lambda|\mathbf{p}|. \quad (5)$$

Решение уравнения (5) хорошо известно из нерелятивистской теории спина (см. 5.12, 5.14, 5.36). Состояния частицы с определенным значением λ (с. з. λ равны $\pm 1/2$) называют спиральными.

15.22. Подставляя в известные выражения

$$\mathbf{j} = c\Psi^*\boldsymbol{\alpha}\Psi \equiv ic\bar{\Psi}\boldsymbol{\gamma}\Psi, \quad \rho = \Psi^*\Psi \equiv \bar{\Psi}\beta\Psi \quad (1)$$

наиболее общий вид в. ф. состояния дираковской частицы с определенным импульсом \mathbf{p} (и энергией $\varepsilon = \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} \geq mc^2$)

$$\Psi_{\mathbf{p}, \varepsilon} = u(\mathbf{p}, \varepsilon) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)\right], \quad (2)$$

где биспинор u равен (см. предыдущую задачу)

$$u = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix}, \quad N = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2\varepsilon}}, \quad (3)$$

(значение N выбрано таким образом, чтобы нормировка биспинора u совпадала с нормировкой спинора φ , т. е. $u^*u = \varphi^*\varphi$; напомним, что $u^* = N(\varphi^*, \chi^*) = N\left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2}\right)$, $(\sigma\mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2$), находим

$$\rho = \Psi^*\Psi = u^*u = \varphi^*\varphi, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= c\Psi^*\boldsymbol{\alpha}\Psi = cu^*\boldsymbol{\alpha}u = cN^2 \left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2}\right) \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix} = \\ &= cN^2 \left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2}\right) \begin{pmatrix} c\boldsymbol{\sigma}(\sigma\mathbf{p}) \\ \sigma\varphi \end{pmatrix} = \frac{c^2N^2}{\varepsilon + mc^2} \varphi^* [\boldsymbol{\sigma}(\sigma\mathbf{p}) + (\sigma\mathbf{p})\boldsymbol{\sigma}] \varphi. \end{aligned} \quad (5)$$

Выражение (5) можно упростить, если воспользоваться соотношением $\sigma_i(\sigma\mathbf{p}) + (\sigma\mathbf{p})\sigma_i = (\sigma_i\sigma_k + \sigma_k\sigma_i)p_k = 2\delta_{ik}p_k = 2p_i$, так что

$$\mathbf{j} = \frac{2c^2N^2\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi^*\varphi = \frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon} \varphi^*\varphi = \mathbf{v}\varphi^*\varphi = \rho\mathbf{v}, \quad (6)$$

где \mathbf{v} — скорость классической релятивистской частицы, имеющей импульс \mathbf{p} .

15.23. В. ф. рассматриваемого состояния имеет вид $\Psi = u(\mathbf{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)\right]$, где биспинор $u(\mathbf{p})$ равен

$$u(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix}, \quad N = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2\varepsilon}}$$

(см. 15.21; использована нормировка $u^*u = \varphi^*\varphi = 1$).

Среднее значение вектора спина

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{s}} &= \frac{1}{2} \frac{u^*\Sigma u}{u^*u} = \frac{N^2}{2} \left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \right) \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix} = \\ &= \frac{N^2}{2} \varphi^* \left\{ \sigma + \frac{\zeta^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} (\sigma\mathbf{p}) \sigma (\sigma\mathbf{p}) \right\} \varphi = \\ &= \frac{N^2}{2} \varphi^* \left\{ \sigma + \frac{p^2c^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} \sigma_z \sigma \sigma_z \right\} \varphi, \quad \mathbf{p} = (0, 0, p). \end{aligned} \quad (1)$$

Так как $\sigma_z^2 = 1$, $\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y$, $\sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x$, то согласно (1) легко находим

$$\begin{aligned} \bar{s}_x &= \frac{N^2}{2} \varphi^* \left\{ \sigma_x - \frac{p^2c^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} \sigma_x \right\} \varphi = \frac{mc^2}{2\varepsilon} \varphi^* \sigma_x \varphi, \\ \bar{s}_y &= \frac{mc^2}{2\varepsilon} \varphi^* \sigma_y \varphi, \quad \bar{s}_z = 1/2 \varphi^* \sigma_z \varphi \end{aligned} \quad (2)$$

(в нерелятивистской теории $\bar{\mathbf{s}} = 1/2 \varphi^* \sigma \varphi$).

Согласно (2) $|\bar{s}_x|, |\bar{s}_y| \leq mc^2/2\varepsilon$, так что в ультрарелятивистском случае $\varepsilon \gg mc^2$ имеем $\bar{s}_x, \bar{s}_y \rightarrow 0$, т. е. средний вектор спина направлен вдоль оси z , параллельной импульсу частицы (если, конечно, $\varphi^* \sigma_z \varphi \neq 0$).

Полученные ограничения на значения \bar{s}_x, \bar{s}_y означают, что возможные спиновые состояния частицы зависят от ее импульса. Это обстоятельство является непосредственным следствием уравнения Дирака, связанным с некоммутативностью операторов спина и гамильтониана.

15.24. Для рассматриваемого унитарного преобразования легко находим ($\hat{O}^+ = \hat{O}$, $\hat{O}^+\hat{O} = \hat{O}\hat{O}^+ = 1$)

$$\begin{aligned} \beta' &= \hat{U}\beta\hat{U}^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \Sigma' &= \hat{U}\Sigma\hat{U}^+ = \Sigma, \\ \alpha' &= \hat{U}\alpha\hat{U}^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & -\sigma \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Таким образом, операторы спина в новом и исходном представлениях имеют одинаковый вид, а уравнение Дирака в новом представлении

$$(c\hat{\alpha}'\mathbf{p} + mc^2\hat{\beta}')\Psi' = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi', \quad \Psi' = \hat{U}\Psi,$$

записанное через двухкомпонентные спиноры $\Psi' = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$, принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\xi = c\sigma\hat{\mathbf{p}}\xi + mc^2\eta, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\eta = -c\sigma\hat{\mathbf{p}}\eta + mc^2\xi.$$

15.25. В системе отсчета K , в которой частица покоится и $\epsilon = mc^2$, ее спиновое состояние описывается биспинором $u(0) = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ 0 \end{pmatrix}$, где φ_0 — некоторый двухкомпонентный спинор.

В системе K' , движущейся относительно системы K со скоростью $-\mathbf{v}$, частица имеет скорость \mathbf{v} и импульс $\mathbf{p} = m\mathbf{v}/\sqrt{1-(v/c)^2}$, а ее спиновое состояние описывается биспинором $u(\mathbf{p})$, выражающимся через $u(0)$ по известной формуле преобразования Лоренца для биспиноров:

$$u(\mathbf{p}) \equiv u' = \hat{S}u(0), \quad (1)$$

$$\hat{S} = \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}\mathbf{n}\theta\right) = \text{ch}\frac{\theta}{2} - \text{sh}\frac{\theta}{2}\boldsymbol{\alpha}\mathbf{n} \quad (\text{th}\theta = \frac{v}{c}), \quad (2)$$

$\mathbf{n} = -\mathbf{v}/v$ — единичный вектор скорости системы K' относительно K .

Используя соотношения ($\text{th}\theta = v/c$)

$$\text{th}\frac{\theta}{2} = \frac{\text{th}\theta}{1 + \sqrt{1 - \text{th}^2\theta}} = \frac{v/c}{1 + \sqrt{1 - (v/c)^2}} = \frac{pc}{\epsilon(\mathbf{p}) + mc^2},$$

$$\text{ch}\frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{1 + \text{ch}\theta}{2}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \text{th}^2\theta}}\right)} = \sqrt{\frac{\epsilon(\mathbf{p}) + mc^2}{2mc^2}},$$

согласно (1) и (2) легко находим

$$u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \left(\text{ch}\frac{\theta}{2}\right)\varphi_0 \\ \left(\text{sh}\frac{\theta}{2}\right)\frac{\sigma\mathbf{v}}{v}\varphi_0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\epsilon + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\epsilon + mc^2}\varphi_0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Выражение (3) для биспинора $u(\mathbf{p})$ согласуется с общим решением уравнения Дирака, найденным в 15.21. В этом смысле существенным элементом задачи является установление того факта, что спинор φ в биспиноре $u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ во всех лоренцевых системах одинаков (с точностью до нормировки) и равен φ_0

Используя нормировку $\Phi_0^* \Phi_0 = 1$, получаем средний вектор спина частицы в системе K' , где она имеет импульс \mathbf{p} , в виде

$$\bar{\mathbf{s}}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \frac{u^* \Sigma u}{u^* u} = \frac{\varepsilon + mc^2}{4\varepsilon} \Phi_0^* \left\{ \boldsymbol{\sigma} + \frac{c^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}) \boldsymbol{\sigma} (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}) \right\} \Phi_0.$$

Его связь со средним вектором спина в системе покоя частицы $\bar{\mathbf{s}}_0 = 1/2 \Phi_0^* \boldsymbol{\sigma} \Phi_0$ легко установить, если направить ось z вдоль вектора \mathbf{p} :

$$\bar{s}_{x, \mathbf{p}} = \frac{mc^2}{\varepsilon} \bar{s}_{x, 0}, \quad \bar{s}_{y, \mathbf{p}} = \frac{mc^2}{\varepsilon} \bar{s}_{y, 0}, \quad \bar{s}_{z, \mathbf{p}} = \bar{s}_{z, 0} \quad (4)$$

(сравнить с решением задачи 15.23).

15.26. Имея в виду, что $\Psi_{\mathbf{p}\lambda} = u_{\lambda}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)}$,

$$u_{\lambda}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \Phi_{\lambda} \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \Phi_{\lambda} \end{pmatrix}, \quad u_{\lambda}^*(\mathbf{p}) = \left(\Phi_{\lambda}^*, \Phi_{\lambda}^* \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \right),$$

находим

$$\Psi_{\lambda'}^* \Psi_{\lambda} = u_{\lambda'}^* u_{\lambda} = \Phi_{\lambda'}^* \left[1 + \frac{c^2 (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} \right] \Phi_{\lambda} = \frac{2\varepsilon}{\varepsilon + mc^2} \Phi_{\lambda'}^* \Phi_{\lambda} \propto \delta_{\lambda\lambda'},$$

откуда и следует ортогональность рассматриваемых спиновых состояний частицы, отвечающих различным значениям λ .

Ответы на вопросы, поставленные в условии данной задачи, становятся очевидными, если учесть результат предыдущей задачи. Согласно последней спинор φ в биспиноре $u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$, описывающем одно и то же физическое состояние частицы (имеющей определенный импульс) в различных инерциальных системах координат, с точностью до нормировочного множителя во всех системах отсчета одинаков. В системе покоя частицы биспинор имеет вид $u(0) \propto \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$ и соответственно $u_{\lambda}(0) \propto \begin{pmatrix} \Phi_{\lambda} \\ 0 \end{pmatrix}$. Но в системе покоя частицы уравнение $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})\varphi_{\lambda} = \lambda\varphi_{\lambda}$ эквивалентно

$$(\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{n}) u_{\lambda}(0) = \lambda u_{\lambda}(0), \quad (1)$$

т. е. представляет уравнение на с. ф. оператора $\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{n} = 2s\mathbf{n}$ — удвоенной проекции спина на ось, направленную вдоль вектора \mathbf{n} . Таким образом, наглядный смысл вектор \mathbf{n} , фигурирующий в определении биспинора $u_{\lambda}(\mathbf{p})$, имеет не непосредственно в системе отсчета, в которой импульс частицы равен \mathbf{p} , а в системе, где она покоится, определяя направление, проекция на которое спина частицы имеет определенное значение, равное $\lambda/2$.

Вектор $1/2\sigma^* \sigma \phi$ определяет средний вектор спина в системе покоя частицы. Во избежание недоразумений подчеркнем, что в задаче рассматриваются состояния частицы с определенным значением импульса и поэтому имеет смысл говорить о системе покоя частицы.

Рассматриваемой задаче о классификации спиновых состояний частицы с определенным импульсом по квантовому числу λ можно придать ковариантную форму. Для этого введем оператор $\hat{\lambda} = i\gamma_5 \hat{v} \equiv i\gamma_5 (\gamma \mathbf{v} + \gamma_4 v_4)$, где $v_i = (\mathbf{v}, v_4)$ — некоторый единичный 4-вектор (т. е. $v_i^2 = \mathbf{v}^2 + v_4^2 = 1$), ортогональный 4-импульсу частицы $p_i = (\mathbf{p}, i\varepsilon/c)$: $v_i p_i = 0$. Читателю предлагается самостоятельно убедиться в том, что уравнение на с. ф.

$$\hat{\lambda} u_\lambda(\mathbf{p}) = \lambda u_\lambda(\mathbf{p})$$

эквивалентно уравнению $(\sigma \mathbf{n}) \phi_\lambda = \lambda \phi_\lambda$, где связь трехмерного вектора \mathbf{n} с 4-вектором v_i определяется тем условием, что в системе покоя частицы v_i имеет вид $v_i = (\mathbf{n}, 0)$.

15.27. Решение уравнения Дирака, отвечающее определенным импульсу \mathbf{p} и энергии ε частицы (см. 15.21),

$$\Psi_{\mathbf{p}, \varepsilon} = \begin{pmatrix} \varphi_{\mathbf{p}} \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)} \equiv \begin{pmatrix} \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon - mc^2} \chi_{\mathbf{p}} \\ \chi_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)} \quad (1)$$

$$(\varepsilon = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4})$$

при $\varepsilon \geq mc^2$ имеет физический смысл в. ф. состояния частицы с импульсом \mathbf{p} и энергией ε . При $\varepsilon \leq -mc^2$ решение (1) (обозначим его $\Psi_{\mathbf{p}}^{(-)}$), как и суперпозиция таких решений $\Psi^{(-)*}$, не имеет непосредственного смысла в. ф. какого-либо состояния частицы. Такое решение описывает античастицу, причем в. ф. античастицы $\Psi_{\varepsilon}^{(+)}$ получается в результате применения операции зарядового сопряжения \hat{C} к функции $\Psi^{(-)}$: $\Psi_{\varepsilon}^{(+)} = \hat{C}\Psi^{(-)}$. Как известно, это преобразование при используемом стандартном выборе матриц Дирака записывается в явном виде следующим образом:

$$\Psi_{\varepsilon}^{(+)} = \hat{C}\Psi^{(-)} \equiv \gamma_2 \gamma_4 \overline{\Psi^{(-)}} = \gamma_2 \gamma_4 (\Psi^{(-)*} \beta), \quad (2)$$

или более подробно, с указанием биспинорных индексов:

$$\begin{aligned} (\Psi_{\varepsilon}^{(+)})_{\alpha} &= (\gamma_2 \gamma_4)_{\alpha\delta} (\Psi^{(-)*})_{\delta} = (\gamma_2 \gamma_4)_{\alpha\delta} (\Psi^{(-)})_{\mu} \beta_{\mu\delta} = \\ &= (\gamma_2 \gamma_4)_{\alpha\delta} \beta_{\delta\mu} (\Psi^{(-)*})_{\mu} = (\gamma_2 \gamma_4 \beta)_{\alpha\mu} (\Psi^{(-)*})_{\mu} = (\gamma_2)_{\alpha\mu} (\Psi^{(-)*})_{\mu} \end{aligned} \quad (3)$$

(в (3) учтено, что $\beta \equiv \gamma_4$, $\beta^2 = 1$, $\beta_{\mu\delta} = \beta_{\delta\mu}$).

*) Обращаем внимание на соответствие таких обозначений использованным ранее в случае бесспиновой частицы (см. 15.1).

Используя соотношения

$$\Psi_{-p}^{(-)*} = \begin{pmatrix} \frac{c\sigma^*p}{\varepsilon - mc^2} \chi_p^* \\ \chi_p^* \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}(pr - \varepsilon t)}, \quad \gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ i\sigma_3 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma^* = (\sigma_1, -\sigma_2, \sigma_3), \quad \sigma_2 \sigma^* = -\sigma \sigma_2,$$

находим согласно (3) в. ф. состояния античастицы, соответствующего «нефизическому» (т. е. с $\varepsilon \leq -mc^2$) решению уравнения Дирака вида (1):

$$\Psi_c^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ i\sigma_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{c\sigma^*p}{\varepsilon - mc^2} \chi_p^* \\ \chi_p^* \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}(pr - \varepsilon t)} =$$

$$= \begin{pmatrix} -i\sigma_2 \chi_p^* \\ -i \frac{c\sigma p}{\varepsilon - mc^2} \sigma_2 \chi_p^* \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}(pr - \varepsilon t)}. \quad (4)$$

В этом состоянии античастица имеет импульс $p' = -p$ и энергию $\varepsilon' = -\varepsilon = \sqrt{p'^2 c^2 + m^2 c^4} \geq mc^2$. Обозначив $\varphi_{c; p'} \equiv -i\sigma_2 \chi_{-p'}^*$, перепишем (4) в виде

$$\Psi_{c; p', \varepsilon'}^{(+)} = \begin{pmatrix} \varphi_{c; p'} \\ \frac{c\sigma p'}{\varepsilon' + mc^2} \varphi_{c; p'} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(p'r - \varepsilon' t)}, \quad (5)$$

что по форме совпадает, естественно, с в. ф. аналогичного состояния частицы (с импульсом p' и энергией ε').

В. ф. состояния античастицы с определенной спиральностью $\Psi_{c; p', \varepsilon', \lambda}^{(+)}$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{2} (\Sigma n') \Psi_{c; p', \varepsilon', \lambda}^{(+)} = \lambda \Psi_{c; p', \varepsilon', \lambda}^{(+)}, \quad n' = p' / |p'|,$$

из которого следует

$$\frac{1}{2} (\sigma n') \varphi_{c; p', \lambda} = \lambda \varphi_{c; p', \lambda}. \quad (6)$$

Учитывая установленную выше связь спинора $\varphi_{c; p'}$ в в. ф. античастицы $\Psi_{c; p', \varepsilon'}$ со спинором χ_p в решении $\Psi_{-p}^{(-)}$ уравнения Дирака ($\varphi_{c; p'} = -i\sigma_2 \chi_{-p'}^*$), легко заметить, что уравнение (6) эквивалентно уравнению

$$-\frac{1}{2} (\sigma n') \chi_{-p', \lambda} = \lambda \chi_{-p', \lambda}, \quad \text{или} \quad \frac{1}{2} (\sigma n) \chi_{p, \lambda} = \lambda \chi_{p, \lambda}.$$

Это означает, что при зарядовом сопряжении $\Psi_c^{(+)} = \hat{C} \Psi^{(-)}$ квантовое число λ — спиральность — сохраняет свое значение (в то время как импульс и энергия изменяют знак).

15.28. Коммутативность эрмитова оператора $\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
с $\hat{H} = c\alpha \hat{p} = c \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \hat{p}$ очевидна: $[\gamma_5, \hat{H}] = 0$.

Для выяснения физического смысла с. з. μ оператора γ_5 найдем общие с. ф. $\Psi_{\mathbf{p}, \varepsilon, \mu}$ коммутирующих друг с другом операторов \hat{H} , $\hat{\mathbf{p}}$, γ_5 . Эти функции имеют вид (сравнить с 15.21)

$$\Psi_{\mathbf{p}, \varepsilon, \mu} = \begin{pmatrix} \Phi_{\mathbf{p}, \mu} \\ \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon} \Phi_{\mathbf{p}, \mu} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - \varepsilon t)}, \quad \varepsilon = \pm pc, \quad (1)$$

причем из уравнения $\gamma_5 \Psi_{\mathbf{p}, \varepsilon, \mu} = \mu \Psi_{\mathbf{p}, \varepsilon, \mu}$ следует

$$-\frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon} \Phi_{\mathbf{p}, \mu} = \mu \Phi_{\mathbf{p}, \mu}, \quad -\Phi_{\mathbf{p}, \mu} = \mu \frac{c\sigma\mathbf{p}}{\varepsilon} \Phi_{\mathbf{p}, \mu}, \quad (2)$$

откуда $\mu^2 = 1$, т. е. с. з. равны $\mu = \pm 1$.

Функция (1) при $\varepsilon = pc > 0$ (обозначим ее $\Psi_{\mathbf{p}, \mu}^{(+)}$) представляет в. ф. состояния частицы с импульсом \mathbf{p} и энергией $\varepsilon = pc$. При этом уравнения (2) можно записать в виде

$$(\sigma\mathbf{n}) \Phi_{\mathbf{p}, \mu} = -\mu \Phi_{\mathbf{p}, \mu}, \quad \Sigma \mathbf{n} \Psi_{\mathbf{p}, \mu}^{(+)} = -\mu \Psi_{\mathbf{p}, \mu}^{(+)}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|,$$

отсюда вытекает физический смысл с. з. μ : величина $\lambda = -1/2\mu$ является спиральностью частицы, т. е. проекцией спина на направление импульса.

При $\varepsilon = -pc < 0$ для функции (1) (обозначим ее $\Psi_{\mathbf{p}, \mu}^{(-)}$) имеем $(\sigma\mathbf{n}) \Phi_{\mathbf{p}, \mu} = \mu \Phi_{\mathbf{p}, \mu}$, $\Sigma \mathbf{n} \Psi_{\mathbf{p}, \mu}^{(-)} = \mu \Psi_{\mathbf{p}, \mu}^{(-)}$, так что спиральность $\lambda = \mu/2$. В случае $\varepsilon < 0$ непосредственный физический смысл в. ф. имеет $\Psi_{\mathbf{p}, \mu}^{(+)} = \hat{C} \Psi_{-\mathbf{p}, \mu}^{(-)} = \gamma_2 \Psi_{-\mathbf{p}, \mu}^{(-)*}$. Такая в. ф. описывает состояние античастицы с энергией $\varepsilon' = pc > 0$, импульсом $-\mathbf{p}$ и спиральностью $\lambda = \mu/2$ (см. предыдущую задачу).

15.29. Так как $\hat{P}_{\pm}^2 = \hat{P}_{\pm}$, то эрмитовы операторы \hat{P}_{\pm} являются проекционными (см. 1.35).

Учитывая установленную в предыдущей задаче связь с. з. оператора γ_5 со спиральностью, легко сообразить, что оператор \hat{P}_+ проектирует на состояния со спиральностью $\lambda_1 = -1/2$ для частицы и $\lambda_2 = 1/2$ для античастицы. В случае оператора \hat{P}_- знаки спиральностей изменятся на противоположные. Во избежание недоразумений подчеркнем, что в данной задаче рассматривается действие операторов \hat{P}_{\pm} на функцию, являющуюся решением уравнения Дирака с $m=0$: $c\hat{\alpha}\mathbf{p}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$, т. е. в случае античастицы речь идет не непосредственно о ее в. ф. $\Psi_c^{(+)}$, а о решении $\Psi^{(-)}$ уравнения Дирака. Следует иметь в виду, что соотношение $\hat{P}_{\pm}\Psi = \hat{\Psi}$ при зарядовом сопряжении принимает вид $\hat{P}_{\mp}\Psi_c = \hat{\Psi}_c$, т. е. \hat{P}_+ переходит в \hat{P}_- , и обратно, что связано с равенством $\hat{C}\gamma_5 = -\gamma_5\hat{C}$.

15.30. Уравнения Дирака для двухкомпонентных спиноров при $m=0$ имеют вид ($\sigma = 2\hat{\mathbf{s}} \equiv \hat{\mathbf{s}}/s$)

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = c\sigma\mathbf{p}\chi \equiv \frac{c}{s} \hat{\mathbf{s}}\mathbf{p}\chi, \quad i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\sigma\mathbf{p}\varphi \equiv \frac{c}{s} \hat{\mathbf{s}}\mathbf{p}\varphi. \quad (1)$$

Они содержат два спинора φ, χ , описывающие спиновые свойства частицы с $s = 1/2$ по отношению к чисто пространственному вращению системы координат и независимым образом преобразующиеся при таком преобразовании (но не при преобразовании Лоренца).

Естественное обобщение уравнений (1) на случай частицы с произвольным спином s состоит в отождествлении в этих уравнениях φ и χ с двумя спиновыми функциями, отвечающими спину s и имеющими по $2s + 1$ компонент каждая; при этом под \hat{s} следует понимать оператор спина величины s (вид которого в s_z -представлении хорошо известен).

В случае спина $s = 1$ удобно использовать не s_z -, а векторное представление, в котором компоненты спиновой функции являются декартовыми компонентами вектора (см. задачи § 4 главы 3), а операторы компонент спина определяются соотношениями

$$\hat{s}_i a_k \equiv -i \varepsilon_{ikl} a_l.$$

При этом $\hat{s} \mathbf{p} a_k = \hat{s}_i \hat{p}_i a_k = -\hbar \varepsilon_{ikl} \frac{\partial}{\partial x_l} a_l \equiv \hbar (\text{rot } \mathbf{a})_k$, т. е. $(\hat{s} \mathbf{p}) \mathbf{a} = \hbar \text{rot } \mathbf{a}$, и, отождествив в уравнениях (1) φ, χ соответственно с векторами $\boldsymbol{\xi}, i \boldsymbol{\mathcal{H}}$, перепишем их в виде

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\xi} = \text{rot } \boldsymbol{\mathcal{H}}, \quad -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\mathcal{H}} = \text{rot } \boldsymbol{\xi},$$

представляющем часть системы уравнений Максвелла.

Два других уравнения: $\text{div } \boldsymbol{\xi} = 0, \text{div } \boldsymbol{\mathcal{H}} = 0$ — представляют дополнительные условия, которым удовлетворяют векторы $\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\mathcal{H}}$.

Подробное изложение квантовой механики фотона содержится в книге [7].

15.31. Плотность тока и плотность заряда для дираковской частицы имеют вид

$$\mathbf{j} = e c \Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi \equiv i e c \bar{\Psi} \boldsymbol{\gamma} \Psi, \quad \rho = e \Psi^* \Psi \equiv e \bar{\Psi} \gamma_4 \Psi. \quad (1)$$

Подчеркнем, что выражения (1) справедливы как для свободной частицы, так и для частицы во внешнем электромагнитном поле (хотя в (1) потенциалы поля \mathbf{A}, A_0 в явном виде не входят!).

В нерелятивистском пределе (энергия частицы $\varepsilon \approx mc^2$) в в. ф. (биспиноре) $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ спинор χ , удовлетворяющий уравнению

$$i \hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c \boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi - mc^2 \chi + e A_0 \chi,$$

приближенно равен (так как $i \hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} \approx mc^2 \chi$)

$$\chi \approx \frac{1}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi, \quad \text{т. е. } |\chi| \ll |\varphi|,$$

так что

$$\Psi \approx \left(\frac{1}{2mc} \sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi \right). \quad (2)$$

Соответственно

$$\begin{aligned} \Psi^* &= \left(\varphi^*, \left[\frac{1}{2mc} \sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi \right]^* \right) = \\ &= \left(\varphi^*, \frac{1}{2mc} \left(\left(-\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi^* \sigma \right) \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Используя (2), (3), согласно (1) легко находим с точностью до членов порядка $(1/c)^2$

$$\rho = e\Psi^*\Psi \approx e\varphi^*\varphi, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= ec\Psi^* \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \Psi = \\ &= ec \left(\varphi^*, \frac{1}{2mc} \left(\left(-\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi^* \sigma \right) \right) \begin{pmatrix} \sigma & \left(\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) \varphi \\ \sigma \varphi & \end{pmatrix} = \\ &= \frac{e}{2m} \left\{ \varphi^* \sigma \left(\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) \varphi - \left(\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi^* \sigma \right) \sigma \varphi \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Используя соотношение $\sigma_i \sigma_k = \delta_{ik} + i\epsilon_{ikl} \sigma_l$, выражение (5) можно упростить:

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{e}{2m} \left\{ \varphi^* \sigma_i \sigma_k \left(\hat{p}_k - \frac{e}{c} A_k \right) \varphi - \left(\left(\hat{p}_k + \frac{e}{c} A_k \right) \varphi^* \right) \sigma_k \sigma_i \varphi \right\} = \\ &= \frac{e}{2m} \left\{ \varphi^* \hat{p}_i \varphi - (\hat{p}_i \varphi^*) \varphi - \frac{2e}{c} A_i \varphi^* \varphi + i\epsilon_{ikl} [\varphi^* \sigma_i \hat{p}_k \varphi + (\hat{p}_k \varphi^*) \sigma_l \varphi] \right\}, \end{aligned}$$

и так как

$$\epsilon_{ikl} \left[\varphi^* \sigma_l \frac{\partial}{\partial x_k} \varphi + \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \varphi^* \right) \sigma_l \varphi \right] \equiv \epsilon_{ikl} \frac{\partial}{\partial x_k} \varphi^* \sigma_l \varphi \equiv \{\text{rot}(\varphi^* \sigma \varphi)\}_i,$$

то

$$\mathbf{j} = -\frac{ie\hbar}{2m} [\varphi^* \nabla \varphi - (\nabla \varphi^*) \varphi] - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \varphi^* \varphi + \frac{e\hbar}{2m} \text{rot}(\varphi^* \sigma \varphi). \quad (6)$$

Полученные выражения (4), (6) совпадают с формулами нерелятивистской теории для плотности заряда и тока частицы со спином $s=1/2$, имеющей заряд e и спиновый магнитный момент $\mu = e\hbar/2mc$ (см. [3]).

15.32. Учитывая явный вид матриц Дирака и тензора

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{H}_z & -\mathcal{H}_y & -i\mathcal{E}_x \\ -\mathcal{H}_z & 0 & \mathcal{H}_x & -i\mathcal{E}_y \\ \mathcal{H}_y & -\mathcal{H}_x & 0 & -i\mathcal{E}_z \\ i\mathcal{E}_x & i\mathcal{E}_y & i\mathcal{E}_z & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} F_{Ai} &= -F_{iA} = i\mathcal{E}_i, \\ F_{ik} &= \epsilon_{ikl} \mathcal{H}_l, \\ i, k &= 1, 2, 3, \end{aligned}$$

рассматриваемый гамильтониан легко преобразовать к виду

$$\hat{H} = c\hat{\alpha}\hat{\mathbf{p}} - \kappa\beta\Sigma\mathcal{H} + i\kappa\beta\alpha\mathcal{E} + mc^2\beta. \quad (1)$$

Уравнение $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}\Psi$, записанное через двухкомпонентные спиноры φ, χ в биспинорной в. ф. $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$, имеет вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi &= c\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}}\chi + mc^2\varphi + i\kappa\sigma\mathcal{E}\chi - \kappa\sigma\mathcal{H}\varphi, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi &= c\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}}\varphi - mc^2\chi - i\kappa\sigma\mathcal{E}\varphi + \kappa\sigma\mathcal{H}\chi. \end{aligned} \quad (2)$$

Для перехода к нерелятивистскому пределу, когда энергия частицы $\varepsilon \approx mc^2$, следует, как обычно, выделить из в. ф. множитель $e^{-imc^2t/\hbar}$, т. е. записать ее в виде $\Psi = e^{-imc^2t/\hbar} \tilde{\Psi} = e^{-imc^2t/\hbar} \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$, и учесть неравенство

$$\left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi} \right| \sim |E\tilde{\Psi}| \ll mc^2 |\tilde{\Psi}| \quad (3)$$

в выражении

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = e^{-imc^2t/\hbar} \left[mc^2\Psi + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi} \right]$$

(E — характерная величина энергии нерелятивистской частицы). При этом второе уравнение в (2) принимает вид

$$2mc^2\tilde{\chi} - \kappa\sigma\mathcal{H}\tilde{\chi} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\chi} = (c\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}} - i\kappa\sigma\mathcal{E})\tilde{\varphi}. \quad (4)$$

С учетом (3) и неравенства $|\kappa\mathcal{H}| \ll mc^2$ из (4) следует

$$\tilde{\chi} \approx \frac{1}{2mc} \left(\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}} - \frac{i\kappa}{c} \sigma\mathcal{E} \right) \tilde{\varphi}, \quad (5)$$

откуда, как и в случае свободной нерелятивистской частицы, $|\tilde{\chi}| \ll |\tilde{\varphi}|$.

Подставляя (5) в первое из уравнений (2) (предварительно выделив из φ, χ множитель $e^{-imc^2t/\hbar}$), легко получаем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}} + \frac{i\kappa}{c} \sigma\mathcal{E} \right) \left(\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}} - \frac{i\kappa}{c} \sigma\mathcal{E} \right) \tilde{\varphi} - \kappa\sigma\mathcal{H}\tilde{\varphi}. \quad (6)$$

Используя соотношение $\sigma_i\sigma_k = \delta_{ik} + i\varepsilon_{ikl}\sigma_l$ и записав $\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}} = \sigma_i\hat{p}_i$, $\sigma\mathcal{E} = \sigma_k\mathcal{E}_k$, находим

$$(\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}})(\sigma\mathcal{E}) - (\sigma\mathcal{E})(\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}}) = (\hat{\mathbf{p}}\mathcal{E}) - (\mathcal{E}\hat{\mathbf{p}}) + i[\hat{\mathbf{p}}\mathcal{E}]\sigma - i[\mathcal{E}\hat{\mathbf{p}}]\sigma, \quad (7)$$

причем

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{p}}\mathcal{E}) - (\mathcal{E}\hat{\mathbf{p}}) &= -i\hbar \operatorname{div} \mathcal{E}, \\ [\hat{\mathbf{p}}\mathcal{E}] - [\mathcal{E}\hat{\mathbf{p}}] &= -i\hbar \operatorname{rot} \mathcal{E} - 2[\hat{\mathcal{E}}\hat{\mathbf{p}}] = -2[\hat{\mathcal{E}}\hat{\mathbf{p}}]. \end{aligned} \quad (8)$$

Учитывая равенства $(\sigma\hat{\mathbf{p}})^2 = \hat{\mathbf{p}}^2$, (7) и (8) и пренебрегая слагаемым, пропорциональным $(\mathcal{E}/c)^2$, запишем (6) в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \tilde{\varphi} - \kappa \sigma \mathcal{H} \tilde{\varphi} + \frac{\kappa}{mc} \left(-\frac{\hbar}{2} \operatorname{div} \boldsymbol{\varepsilon} - [\boldsymbol{\varepsilon} \hat{\mathbf{p}}] \sigma \right) \tilde{\varphi}. \quad (9)$$

Имея в виду отмеченную выше малость спинора $\tilde{\chi}$ по сравнению с $\tilde{\varphi}$ и пренебрегая им, можно ограничиться в нерелятивистском пределе описанием частицы со спином $s = 1/2$ лишь одним спинором $\tilde{\varphi}$ (как это делается в последовательно нерелятивистской теории). При этом уравнение (9) представляет у. Ш. с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \kappa \sigma \mathcal{H} + \frac{\kappa}{mc} \left(-\frac{\hbar}{2} \operatorname{div} \boldsymbol{\varepsilon} - [\boldsymbol{\varepsilon} \hat{\mathbf{p}}] \sigma \right). \quad (10)$$

Отсутствие в \hat{H} слагаемого вида eA_0 означает, что описываемая им частица нейтральна (A_0 — скалярный потенциал внешнего электростатического поля), а наличие слагаемого $-\kappa \sigma \mathcal{H}$ указывает на то, что частица имеет магнитный момент, равный $\boldsymbol{\mu} \equiv \kappa$.

Последний, третий член в (10) описывает спин-орбитальное взаимодействие. При этом слагаемое $-\frac{\kappa}{mc} [\boldsymbol{\varepsilon} \hat{\mathbf{p}}] \sigma$ в этом взаимодействии является естественным квантовомеханическим обобщением энергии взаимодействия движущегося классического магнитного диполя с электростатическим полем (см. 13.43).

Гамильтониан (1) (и его нерелятивистский предел (10)) используют для описания нейтрона в электромагнитном поле. Выражение $\frac{i\boldsymbol{\mu}'}{2} \beta \gamma_\tau \gamma_\nu F_{\tau\nu}$ применяют также для описания взаимодействия с электромагнитным полем *аномального* магнитного момента $\boldsymbol{\mu}'$ заряженных частиц со спином $s = 1/2$ *). При этом взаимодействие *нормальной* части магнитного момента, равной $e\hbar/2mc$ (как и заряда e частицы с полем), описывается, как известно, выражением $-e\boldsymbol{\alpha}\mathbf{A} + eA_0$.

15.33. Энергетический спектр и соответствующие биспинорные в. ф. стационарных состояний частицы определяются из решения уравнения Дирака в магнитном поле (e — заряд час-

*) Для частицы со спином $s = 1/2$, имеющей заряд e и магнитный момент $\boldsymbol{\mu}$, «разбиение» последнего на нормальную и аномальную части определяется соотношением

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_{\text{норм}} + \boldsymbol{\mu}_{\text{ан}}, \quad \boldsymbol{\mu}_{\text{норм}} = \frac{e\hbar}{2mc}, \quad \boldsymbol{\mu}_{\text{ан}} \equiv \boldsymbol{\mu}' = \boldsymbol{\mu} - \frac{e\hbar}{2mc}.$$

Соответственно релятивистское волновое уравнение для такой частицы в электромагнитном поле имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left\{ c\boldsymbol{\alpha} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + mc^2\beta + eA_0 + \frac{i\boldsymbol{\mu}'}{2} \beta \gamma_\tau \gamma_\nu F_{\tau\nu} \right\} \Psi.$$

тицы)

$$\left[c\alpha \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + mc^2\beta \right] u = \varepsilon u, \quad \Psi_{\varepsilon}(\mathbf{r}, t) = u e^{-\frac{i\mathbf{e}\mathbf{t}}{\hbar}} \equiv \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} e^{-\frac{i\mathbf{e}\mathbf{t}}{\hbar}},$$

или

$$\begin{aligned} (\varepsilon - mc^2) \varphi &= c\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi, \\ (\varepsilon + mc^2) \chi &= c\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi. \end{aligned} \quad (1)$$

Исключая спинор χ из системы (1), получаем

$$(\varepsilon^2 - m^2c^4) \varphi = c^2 \left(\sigma \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 \varphi. \quad (2)$$

Так как (см., например, 6.22)

$$\left(\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 = \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{c} \sigma \mathcal{H} \quad (\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}),$$

то уравнение (2) можно записать в виде

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \sigma \mathcal{H} \right\} \varphi = \frac{\varepsilon^2 - m^2c^4}{2mc^2} \varphi, \quad (3)$$

отличающемся лишь заменой E на $(\varepsilon^2 - m^2c^4)/2mc^2$ от уравнения Паули для частицы со спином $s = 1/2$, имеющей заряд e и магнитный момент $\mu = e\hbar/2mc$. Это уравнение для случая однородного магнитного поля \mathcal{H}_0 было решено в 6.21. При калибровке векторного потенциала $\mathbf{A} = (0, \mathcal{H}_0 x, 0)$ решение уравнения (3) имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n p_z \sigma_z}^2 - m^2c^4 &= 2mc^2 \left[\hbar\omega_0 (n + 1/2) - \frac{e\hbar\mathcal{H}_0}{2mc} \sigma_z + \frac{p_z^2}{2m} \right], \\ n &= 0, 1, \dots, \\ \varphi_{n p_y p_z \sigma_z} &= \\ &= C e^{\frac{i}{\hbar} (p_y y + p_z z)} \exp \left[-\frac{1}{2a^2} \left(x - \frac{c p_y}{e\mathcal{H}_0} \right)^2 \right] H_n \left(\frac{1}{a} \left(x - \frac{c p_y}{e\mathcal{H}_0} \right) \right) \varphi_{\sigma_z}, \\ \omega_0 &= \frac{|e| \hbar \mathcal{H}_0}{mc}, \quad a = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e| \mathcal{H}_0}}, \end{aligned} \quad (4)$$

где постоянный спинор φ_{σ_z} — с. ф. оператора $\hat{\sigma}_z$, отвечающая с. з. $\sigma_z = \pm 1$ (напомним, что ось z направлена вдоль \mathcal{H}_0).

Второе из уравнений (1) определяет спинор $\chi_{n p_y p_z \sigma_z}$, а тем самым и в. ф. $\Psi_{n p_y p_z \sigma_z}$ стационарных состояний.

Квантовое число $s_z = 1/2 \sigma_z$ в нерелятивистской теории определяет проекцию спина частицы на ось z . В релятивистском случае σ_z утрачивает этот смысл, так как спинор $\chi_{n p_y p_z \sigma_z}$ не

является с. ф. $\hat{\sigma}_z$ и соответственно в. ф. $\Psi_{n p_y p_z \sigma_z}$ не является с. ф. оператора $\hat{s}_z = 1/2 \Sigma_z$.

Согласно (4) заданным квантовым числам n, p_z, σ_z отвечают два значения энергии, различающиеся знаком. Одно из них, $\varepsilon \geq mc^2$, непосредственно представляет энергетический спектр частицы; другое, $\varepsilon \leq -mc^2$, соответствует античастице, имеющей положительную энергию (сравнить со случаем свободной частицы, рассмотренным в 15.27). Таким образом, энергетические спектры в магнитном поле частицы и античастицы одинаковы — очевидный физический результат (сравните со случаем бесспиновой частицы, рассмотренным в 15.11).

15.34. Гамильтониан дираковской частицы во внешнем электростатическом поле:

$$\hat{H} = c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\hat{\beta} + e_1 A_0(r) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{V} = e_1 A_0 = Zee_1/r.$$

Возмущение $\hat{V} = Zee_1/r$ вызывает переходы между различными состояниями свободной частицы.

При нормировке в. ф. начального состояния частицы с определенным импульсом \mathbf{p}_1 на единичную плотность потока (см. 15.22):

$$\Psi_i = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \Phi_i \\ c\sigma\mathbf{p} \\ \varepsilon + mc^2 \Phi_i \end{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{v}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1\mathbf{r} - \varepsilon t)}, \quad \mathbf{j} = \Psi_i^* \boldsymbol{\alpha} \Psi_i = \frac{\mathbf{v}}{v} \quad (1)$$

(ε, v — энергия и скорость частицы), а в. ф. конечного состояния с импульсом \mathbf{p}_2 — на единичную плотность вероятности:

$$\Psi_f = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \Phi_f \\ c\sigma\mathbf{p}_2 \\ \varepsilon + mc^2 \Phi_f \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_2\mathbf{r} - \varepsilon t)}, \quad \rho = \Psi_f^* \Psi_f = 1 \quad (2)$$

(спиноры $\Phi_{i,f}$ в (1), (2) нормированы на единицу: $|\Phi_{i,f}|^2 = 1$, энергия частицы в начальном и конечном состояниях одинакова) — известная формула теории возмущений для дифференциальной вероятности перехода в единицу времени определяет дифференциальное сечение рассеяния [3]:

$$d\sigma = d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{if}|^2 d\rho_f. \quad (3)$$

Плотность конечных состояний равна

$$d\rho_f = \int \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i) \frac{d^3 p_f}{(2\pi\hbar)^3} \equiv \int \delta(\varepsilon - \varepsilon_2) \frac{p_2 \varepsilon_2 d\varepsilon_2 d\Omega_2}{(2\pi\hbar)^3 c^2} \equiv \frac{p\varepsilon d\Omega}{(2\pi\hbar)^3 c^2}. \quad (4)$$

Матричный элемент возмущения имеет вид ($\mathbf{q} = (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)/\hbar$)

$$\begin{aligned} V_{if} &= \int \Psi_f^* \hat{V} \Psi_i d^3 r = \\ &= \frac{Zee_1(\varepsilon + mc^2)}{2\varepsilon\sqrt{v}} \int \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{r} d^3 r \Phi_f^* \left[1 + \frac{c^2(\sigma\mathbf{p}_2)(\sigma\mathbf{p}_1)}{(\varepsilon + mc^2)^2} \right] \Phi_i \end{aligned} \quad (5)$$

Используя соотношения (θ — угол рассеяния)

$$\begin{aligned} (\sigma_{\mathbf{p}_2})(\sigma_{\mathbf{p}_1}) &= p_{2i}p_{1k}\sigma_i\sigma_k = p_{2i}p_{1k}(\delta_{ik} + ie_{ikl}\sigma_l) = \mathbf{p}_1\mathbf{p}_2 + i[\mathbf{p}_2\mathbf{p}_1]\boldsymbol{\sigma} = \\ &= p^2 \cos \theta - ip^2 \sin \theta \boldsymbol{\sigma}\mathbf{v}, \quad \mathbf{v} = [\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2]/|\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2|, \quad v^2 = 1, \\ \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{d^3r}{r} &= \frac{4\pi}{q^2} = \frac{\pi\hbar^2}{p^2 \sin^2(\theta/2)}, \end{aligned}$$

преобразуем (5) к более удобному виду:

$$\begin{aligned} V_{if} &= \frac{\pi Zee_1\hbar^2}{2\varepsilon p^2 \sqrt{v} (\varepsilon + mc^2) \sin^2(\theta/2)} \varphi_i^* \{(\varepsilon + mc^2)^2 + \\ &+ p^2 c^2 \cos \theta - ip^2 c^2 \sin \theta \boldsymbol{\sigma}\mathbf{v}\} \varphi_i. \end{aligned} \quad (6)$$

Выражения (3), (4), (6) определяют дифференциальное сечение рассеяния. Оно зависит от энергии частицы, угла рассеяния, а также от спиновых состояний частицы до и после рассеяния, описываемых спинорами φ_i, φ_f . Не интересуясь поляризационными явлениями при рассеянии, выполним в дифференциальном сечении усреднение по спиновому состоянию частицы в падающем пучке (предполагая его неполяризованным) и суммирование по спиновым состояниям рассеянной частицы (ниже эта операция обозначена чертой над матричным элементом). Воспользовавшись известным из нерелятивистской теории соотношением (см. [3])

$$|\overline{\varphi_i^* (f_1 + if_2 \boldsymbol{\sigma}\mathbf{v}) \varphi_i}|^2 = |f_1|^2 + |f_2|^2,$$

легко находим в рассматриваемом случае

$$\begin{aligned} |\overline{\varphi_i^* \{(\varepsilon + mc^2)^2 + p^2 c^2 \cos \theta - ip^2 c^2 \sin \theta \boldsymbol{\sigma}\mathbf{v}\} \varphi_i}|^2 &= \\ &= 4\varepsilon^2 (\varepsilon + mc^2)^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2(\theta/2)\right) \end{aligned}$$

и окончательное выражение для дифференциального сечения рассеяния:

$$d\sigma \equiv \overline{d\sigma} = \frac{(Zee_1)^2}{4p^2 v^2 \sin^4(\theta/2)} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2(\theta/2)\right) d\Omega. \quad (7)$$

В нерелятивистском пределе $v/c \ll 1$, $p \approx mv$ выражение (7) переходит в формулу Резерфорда.

Укажем, что условие применимости проведенного рассмотрения имеет вид $|Zee_1| \ll \hbar v$.

15.35. Выражение для дифференциального сечения рассеяния можно получить непосредственно из формулы (7) предыдущей задачи, если произвести в ней очевидную замену

$$\frac{\pi Zee_1 \hbar^2}{p^2 \sin^2(\theta/2)} = \int \frac{Zee_1}{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV \rightarrow e_1 \int A_0(r) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV \equiv e_1 \tilde{A}_0(q),$$

так что

$$d\sigma = \frac{e_1^2 p^2 \tilde{A}_0^2(q)}{4\pi^2 \hbar^4 v^2} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2(\theta/2)\right) d\Omega, \quad (1)$$

Воспользовавшись соотношениями $\hbar^2 q^2 = 2p^2(1 - \cos \theta)$ и $d\Omega = \frac{\pi \hbar^2}{p^2} dq^2$, находим полное сечение рассеяния:

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{e_1^2}{4\pi \hbar^2 v^2} \int_0^{4p^2/\hbar^2} \tilde{A}_0^2(q) \left(1 - \frac{\hbar^2 v^2}{4p^2 c^2} q^2\right) dq^2. \quad (2)$$

При $\varepsilon \rightarrow \infty$ имеем $p \approx \varepsilon/c$, $v \approx c$. Учитывая, что в интеграле (2) существенна область конечных значений $q^2 \lesssim R^{-2}$, где R — радиус потенциала $A_0(r)$, замечаем, что при $\varepsilon \rightarrow \infty$ сечение рассеяния стремится к постоянному значению:

$$\sigma(\varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow \infty} \sigma_0 = \frac{e_1^2}{4\pi \hbar^2 c^2} \int_0^\infty \tilde{A}_0^2(q) dq^2. \quad (3)$$

Отметим, что сходимость интеграла в (3) на нижнем пределе ($q^2 \rightarrow 0$) предполагает достаточно быстрое убывание потенциала $A_0(r)$ при $r \rightarrow \infty$, а именно $|A_0(r)| < B/r^2$ (так же как и в нерелятивистском случае; иначе полное сечение рассеяния обращается в бесконечность).

15.36. Воспользовавшись соотношением

$$-\hbar^2 c^2 \Delta - \varepsilon^2 + m^2 c^4 \equiv (c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\beta - \varepsilon)(c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\beta + \varepsilon)$$

и известным видом функций Грина у. Ш. для свободной частицы

$$(-\Delta - k^2)g^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad g^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

имеем

$$\begin{aligned} (-\hbar^2 c^2 \Delta - \hbar^2 c^2 k^2) \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi \hbar^2 c^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} &\equiv \\ &\equiv (c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\beta - \varepsilon)(c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\beta + \varepsilon) \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi \hbar^2 c^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \end{aligned}$$

откуда непосредственно следует вид искомым функций Грина:

$$\hat{G}_s^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi \hbar^2 c^2} (c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\beta + \varepsilon) \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

или, с явным указанием биспинорных индексов,

$$\hat{G}_{\mathbf{s}; \alpha\beta}^{(\pm)} = \frac{1}{4\pi \hbar^2 c^2} (-i\hbar c \hat{\alpha}\nabla + mc^2\beta + \varepsilon)_{\alpha\beta} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Воспользовавшись соотношением

$$-\hbar^2 c^2 \Delta - \varepsilon^2 + m^2 c^4 \equiv (ic\hat{p} + mc^2)(-ic\hat{p} + mc^2),$$

совершенно аналогично предыдущему находим вид функций Грина:

$$\hat{f}_s^{(\pm)} = \frac{-ic\hat{p} + mc^2}{4\pi \hbar^2 c^2} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{-\hbar c \nabla + \varepsilon \gamma_4 + mc^2}{4\pi \hbar^2 c^2} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

15.37. Записав уравнение Дирака в виде (e_1 — заряд частицы)

$$(c\hat{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\beta - \varepsilon) \Psi(\mathbf{r}) = (e_1\alpha\mathbf{A} - e_1A_0) \Psi(\mathbf{r})$$

и воспользовавшись функцией Грина $\hat{G}_\varepsilon^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, найденной в предыдущей задаче, представим его в форме интегрального уравнения:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) + \int \hat{G}_\varepsilon^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (e_1\alpha\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')) \Psi(\mathbf{r}') dV',$$

где Ψ_0 — общее решение уравнения Дирака для свободной частицы с энергией ε . Выбрав в качестве Ψ_0 в. ф. состояния частицы с определенным импульсом $\mathbf{p}_1 = \hbar\mathbf{k}_1$, получаем уравнение

$$\Psi_{\mathbf{p}_1}^{(+)}(\mathbf{r}) = u_1(\mathbf{p}_1) e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} + \frac{1}{4\pi\hbar^2c^2} (c\hat{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\beta + \varepsilon) \times \\ \times \int \frac{e^{i\mathbf{k}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} (e_1\alpha\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')) \Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}') dV'. \quad (1)$$

При $r \rightarrow \infty$ второе слагаемое в правой части (1) принимает вид (сравнить с решением задачи 13.1)

$$\frac{1}{4\pi\hbar^2c^2} (c\hat{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\beta + \varepsilon) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \int e^{-i\mathbf{k} \frac{r\mathbf{r}'}{r}} (e_1\alpha\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')) \Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}') dV'.$$

В этом выражении оператором импульса следует действовать только на сомножитель $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ (при этом $\hat{\mathbf{p}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \hbar\mathbf{k} \frac{\mathbf{r}}{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$; действие $\hat{\mathbf{p}}$ на другие сомножители: $1/r$, $e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}\mathbf{r}')/r}$ дает асимптотически несущественные слагаемые, убывающие при $r \rightarrow \infty$, как r^{-2}). Соответственно уравнение (1) при $r \rightarrow \infty$ принимает вид

$$\Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}) = u_1(\mathbf{p}_1) e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} + F \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r},$$

где биспинор

$$F = \frac{c\alpha\mathbf{p}_2 + mc^2\beta + \varepsilon}{4\pi\hbar^2c^2} \int e^{-i\mathbf{k}_2\mathbf{r}'} (e_1\alpha\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')) \Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}') dV' \\ (\mathbf{p}_2 = \hbar\mathbf{k}_2 = \hbar\mathbf{k} \frac{\mathbf{r}}{r}) \quad (2)$$

представляет амплитуду рассеянной волны (сравнить с 13.1).

В борновском приближении вместо точной в. ф. $\Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r})$ в (2) следует взять ее невозмущенное значение $u_1(\mathbf{p}_1) e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}}$; при этом ($\mathbf{q} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$)

$$F \approx F_B \equiv \hat{F}_B u_1(\mathbf{p}_1), \\ \hat{F}_B = \frac{c\alpha\mathbf{p}_2 + mc^2\beta + \varepsilon}{4\pi\hbar^2c^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} (e_1\alpha\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')) dV'. \quad (3)$$

Оператор (матрица) \hat{F}_B является матрицей рассеяния в борновском приближении. Его матричные элементы $u_2^*(\mathbf{p}_2) \hat{F}_B u_1(\mathbf{p}_1)$ при нормировке биспиноров $u_{1,2}^* u_{1,2} = 1$ определяют соответствующее дифференциальное сечение рассеяния:

$$d\sigma_{12} = |u_2^*(\mathbf{p}_2) \hat{F}_B u_1(\mathbf{p}_1)|^2 d\Omega_2 \quad (4)$$

(подчеркнем, что выражение (4) зависит от спиновых состояний рассеиваемой и рассеянной частиц, описываемых соответствующими биспинорами). Если спиновое состояние рассеянной частицы не фиксируется, то дифференциальное сечение рассеяния в этом случае, в соответствии со смыслом биспинорной амплитуды рассеяния, определяется выражением $d\sigma = F^* F d\Omega_2$.

Выражение (4), в котором \hat{F}_B определяется формулой (3), можно упростить, если учесть, что согласно уравнению Дирака

$$(c\alpha\mathbf{p}_2 + mc^2\beta) u(\mathbf{p}_2) = \epsilon u(\mathbf{p}_2), \quad u^*(\mathbf{p}_2)(c\alpha\mathbf{p}_2 + mc^2\beta) = \epsilon u^*(\mathbf{p}_2).$$

Поэтому

$$u_2^*(\mathbf{p}_2) \hat{F}_B u_1(\mathbf{p}_1) \equiv u_2^*(\mathbf{p}_2) \hat{G}_B u_1(\mathbf{p}_1), \quad (5)$$

где

$$\hat{G}_B = \frac{e_1 e}{2\pi\hbar^2 c^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} (\alpha\mathbf{A}(\mathbf{r}) - A_0(\mathbf{r})) dV. \quad (6)$$

Дифференциальное сечение рассеяния

$$d\sigma_{12} = |u_2^*(\mathbf{p}_2) \hat{G}_B u_1(\mathbf{p}_1)|^2 d\Omega_2 \quad (7)$$

(подчеркнем, что (7) тождественно (4)) в случае чисто электростатического поля описывается выражением

$$d\sigma_{12} = \left| \frac{e_1 e}{2\pi\hbar^2 c^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} A_0(\mathbf{r}) dV u_2^*(\mathbf{p}_2) u_1(\mathbf{p}_1) \right|^2 d\Omega_2. \quad (8)$$

Как легко заметить, (8) совпадает с результатами для дифференциального сечения рассеяния, полученными в 15.34 и 15.35, а расчет по формуле (8) дифференциального сечения рассеяния неполяризованных частиц в кулоновском поле $A_0 = Ze/r$ дублирует соответствующую часть решения задачи 15.34, к которой мы и отсылаем читателя.

Г л а в а 16

ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

16.1. Имеем

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = 0, \quad \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 = Q_0 \quad (\epsilon_a = mv_a^2/2 = p_a^2/2m). \quad (1)$$

Суммарную кинетическую энергию 2-й и 3-й частиц представим в виде

$$\epsilon_{23} \equiv \epsilon_2 + \epsilon_3 = \frac{P^2}{2M} + \frac{\mu v_{отн}^2}{2} = \frac{p_1^2}{4m} + \frac{m(v_2 - v_3)^2}{4} \quad (2)$$

($\mathbf{P} = \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = -\mathbf{p}_1$; $M = 2m$, $\mu = m/2$ — суммарная и приведенная массы этой пары частиц).

Согласно (1) и (2) имеем

$$\frac{3p_1^2}{4m} + \frac{m(v_2 - v_3)^2}{4} = Q_0, \text{ или } \varepsilon_1 = \frac{2}{3} \left[Q_0 - \frac{m(v_2 - v_3)^2}{4} \right], \quad (3)$$

так что кинетическая энергия 1-й частицы тем больше, чем меньше относительная скорость двух других частиц.

Выражение (3) определяет интервал возможных значений энергии 1-й (а тем самым и любой другой) частицы $0 \leq \varepsilon_a \leq \leq \frac{2}{3}Q_0$ (подчеркнем, что если одна из распадных частиц имеет максимальную возможную энергию $\frac{2}{3}Q_0$, то две другие частицы при этом движутся с одинаковыми скоростями),

16.2. Имеем

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = 0, \quad \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = Q_0 \equiv h. \quad (1)$$

Очевидно, закону сохранения импульса можно удовлетворить лишь при условии ($p_a = \sqrt{2m\varepsilon_a} \geq 0$)

$$|p_2 - p_3| \leq p_1 \leq p_2 + p_3, \quad (2)$$

так что (1) и (2) определяют возможные значения энергий частиц при распаде (и соответственно точки внутри треугольника, которым можно сопоставить распад).

Введем систему координат, как указано на рис. 40 (при этом точка O — в центре треугольника). Пусть точка C (с координатами x, y) соответствует разрешенному по кинематике распаду.

Нетрудно найти

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \frac{h}{3} + y, & \varepsilon_2 &= \frac{h}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y, \\ \varepsilon_3 &= \frac{h}{3} - \frac{\sqrt{3}}{2}x + \frac{1}{2}y. \end{aligned} \quad (3)$$

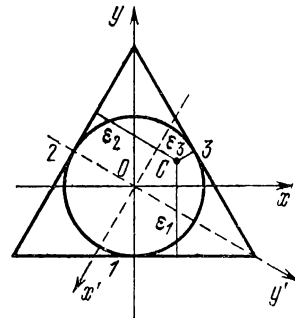


Рис. 40.

Действительно, значение ε_1 очевидно. Аналогично, введя систему координат x', y' (см. рисунок), имеем $\varepsilon_2 = \frac{h}{3} + y'$ и, воспользовавшись формулами преобразования компонент радиуса-вектора при вращении координат (в данном случае — вращение на угол $2\pi/3$), приходим к значению ε_2 , приведенному в (3).

Из (2) имеем $p_2^2 + p_3^2 - 2p_2p_3 \leq p_1^2 \leq p_2^2 + p_3^2 + 2p_2p_3$, или, учитывая (1), $-2\sqrt{\varepsilon_2\varepsilon_3} \leq 2\varepsilon_1 - Q_0 \leq 2\sqrt{\varepsilon_2\varepsilon_3}$, откуда

$$(2\varepsilon_1 - Q_0)^2 \leq 4\varepsilon_2\varepsilon_3. \quad (4)$$

Подставляя в (4) значения (3), легко находим $x^2 + y^2 \leq h^2/9 = Q_0^2/9$, что представляет уравнение круга, вписанного в треугольник (его радиус равен $h/3 = Q_0/3$), и тем самым доказывает утверждение задачи.

16.3. Пусть $\mathbf{p}_a = m_a \mathbf{v}_a$, $E_a = m_a v_a^2/2$; \mathbf{p}_b , E_b — импульсы и энергии частиц a и b в некоторой системе отсчета K . В системе K' , движущейся со скоростью \mathbf{V} относительно системы K , имеем

$$\mathbf{p}'_a = m_a (\mathbf{v}_a - \mathbf{V}), \quad \mathbf{p}'_b = m_b (\mathbf{v}_b - \mathbf{V}),$$

$$E'_a = \frac{m_a}{2} (\mathbf{v}_a - \mathbf{V})^2, \quad E'_b = \frac{m_b}{2} (\mathbf{v}_b - \mathbf{V})^2.$$

Простое вычисление показывает:

$$s' = -(\mathbf{p}'_a + \mathbf{p}'_b)^2 + 2(m_a + m_b)(E'_a + E'_b) = s,$$

т. е. s действительно является галилеевски-инвариантной величиной.

В системе покоя распадающейся частицы A имеем $\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b = 0$, так что $s = 2(m_a + m_b)(E_{a,0} + E_{b,0}) = 2MQ_0$.

16.4. Задачу можно решить аналогично предыдущей. Впрочем, можно обойтись и без вычислений, если заметить, что $s + t = 0$.

16.5. Представим кинетическую энергию частицы a до столкновения в виде

$$E_a = \frac{m_a v_a^2}{2} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mu v_{\text{отн}}^2}{2}, \quad (1)$$

где $M = m_a + m_b$, μ — приведенная масса, $\mathbf{P} = m_a \mathbf{v}_a$ — суммарный импульс системы, $\mathbf{v}_{\text{отн}} = \mathbf{v}_a$. При этом

$$E_a = \frac{\mu v_{\text{отн}}^2}{2} \frac{m_a}{\mu} = \frac{\mu v_{\text{отн}}^2}{2} \left(1 + \frac{m_a}{m_b}\right). \quad (2)$$

Учитывая, что импульс замкнутой системы и соответственно кинетическая энергия поступательного движения центра масс $E_{\text{ц.м}} = \mathbf{P}^2/2M$ сохраняются, замечаем, что на возбуждение частицы b может расходоваться лишь часть энергии E равная $\mu v_{\text{отн}}^2/2$ (второе слагаемое в (1)). При этом условие $\mu v_{\text{отн}}^2/2 \geq Q_0$, согласно (2), определяет значения E_a , при которых может происходить рассматриваемый процесс:

$$E_a \geq (1 + m_a/m_b) Q_0$$

(знак равенства соответствует пороговому значению энергии $E_{\text{пор}}$).

Предельные случаи:

а) $E_{\text{пор}} \approx Q_0$ при $m_a \ll m_b$; б) $E_{\text{пор}} \approx (m_a/m_b) Q_0 \gg Q_0$ при $m_a \gg m_b$.

16.6. Имея в виду диаграмму столкновений для упругого рассеяния (см. [4]), нетрудно сообразить, что в рассматриваемом случае она имеет вид, показанный на рис. 41.

Здесь:

$\vec{AB} = \mathbf{p}_0 = m_a \mathbf{v}_a$ — импульс частицы а в л-системе до столкновения (он же — суммарный импульс системы),

$\vec{OB} = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b} \mathbf{v}_a$ — ее импульс до столкновения в ц-системе,

\vec{OC} — ее импульс в ц-системе,

\vec{AC} — ее импульс в л-системе,

\vec{CB} — импульс частицы b в л-системе

} после столкновения.

Точка C лежит на окружности, радиус которой OC равен величине импульса частиц в ц-системе после столкновения:

$$OC = \sqrt{(OB)^2 - 2\mu Q_0},$$

$$\mu = m_a m_b / (m_a + m_b).$$

Это соотношение — непосредственное следствие закона сохранения энергии, который в ц-системе имеет вид

$$T_i = T_f + Q_0,$$

где $T_{i,f}$ — кинетические энергии относительного движения до и после столкновения ($T_{i,i} = p_{i,i}^2 / 2\mu$).

При упругом столкновении $Q_0 = 0$, так что $OC = OB$. Таким образом, все изменение в диаграмме столкновений для случая неупругого рассеяния сводится к изменению радиуса OC окружности, на которой лежат точки C, определяющие импульсы частиц после столкновения.

Изображенная диаграмма соответствует случаю $m_a > m_b$; при $m_a < m_b$ точка A находится внутри окружности радиуса OB.

Если при столкновении происходит не возбуждение частицы, а, наоборот, возбужденная частица переходит в более низкое энергетическое состояние, то $Q_0 < 0$. В этом случае радиус OC больше чем OB, и, как легко заметить, возможна такая ситуация, когда частица b (покоящаяся до столкновения) после столкновения движется в направлении, противоположном направлению движения падающей частицы а.

16.7. Галилеевски-инвариантный характер величин s, t, u устанавливается непосредственным вычислением (сравнить с решением задачи 16.3).

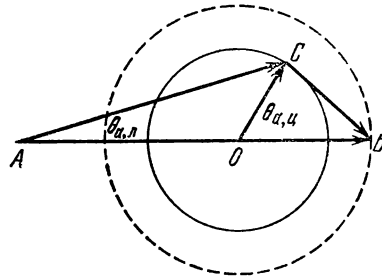


Рис. 41.

В системе центра инерции $\mathbf{p}_a = -\mathbf{p}_b$. При этом $p_a = \sqrt{2\mu E_0}$ (μ — приведенная масса), $\mathbf{p}_a \mathbf{p}'_a = p_a^2 \cos \theta$, где E_0 и θ — кинетическая энергия относительного движения частиц и угол рассеяния в системе центра инерции. Легко найти

$$s = 2(m_a + m_b) E_0, \quad t = -4\mu E_0 (1 - \cos \theta),$$

$$u = -4\mu E_0 (1 + \cos \theta) - 2 \frac{(m_a - m_b)^2}{m_a + m_b} E_0.$$

При этом $s + t + u = 0$.

16.8. Имея в виду результат задачи 16.3, заключаем, что для первого из указанных механизмов реакции величина s имеет вполне определенное значение, равное $s_R = 2MQ_0$ ($M = m_a + m_p$ — масса частицы R), так что распределение по s имеет вид

$$dw = C \delta(s - s_R) ds. \quad (1)$$

Для второго механизма следует ожидать, что распределение по s имеет более или менее плавный вид (рис. 42).

Как известно, энергия системы, способной к распаду (нестабильной частицы), не имеет строго определенного значения, а заключена в интервале шириной порядка $\Gamma = \hbar/\tau$ (τ — время

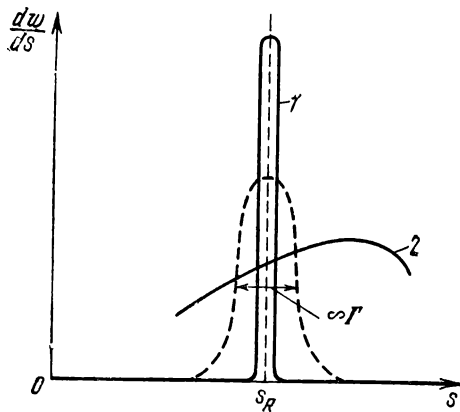


Рис. 42.

жизни частицы). Соответственно энергия распада Q_0 также заключена в интервале шириной Γ , и учет этого обстоятельства приводит к некоторому «размазыванию» δ -функционального распределения (1), изображенному на рисунке пунктирной линией.

Непосредственное экспериментальное наблюдение частиц, имеющих слишком малое время жизни (например, $\tau \sim 10^{-23}$ с у частиц, так называемых резонансов, изучаемых в физике элементарных частиц), часто оказывается невозможным (они проходят слишком малое расстояние за время между их образованием и распадом). Однако наличие импульсно-энергетических корреляций у частиц — продуктов распада типа рассмотренных в данной задаче позволяет идентифицировать такие нестабильные частицы и изучать их свойства (при этом нетрудно обобщить рассмотрение на случай распадов с тремя и более частицами в конечном состоянии и учесть релятивистский характер кинематики изучаемых процессов).

16.9. Пусть $x \rightarrow x' = x'(x)$ представляет некоторое преобразование координат x (для краткости обозначаемых одной бук-

вой) системы. Оператор \hat{O} такого преобразования определяется условием

$$\Psi'(x) = \hat{O}\Psi(x) \equiv \Psi(x'), \quad (1)$$

где $\Psi(x)$ — произвольная в. ф.

Подействуем оператором \hat{O} на функцию $\hat{H}\Psi(x)$, где $\hat{H}(x, \frac{\partial}{\partial x})$ — гамильтониан системы. Используя (1), находим

$$\hat{O}\hat{H}(x, \frac{\partial}{\partial x})\Psi(x) = \hat{H}(x', \frac{\partial}{\partial x'})\Psi(x') = \hat{H}(x', \frac{\partial}{\partial x'})\hat{O}\Psi(x),$$

или

$$\left\{ \hat{O}\hat{H}(x, \frac{\partial}{\partial x}) - \hat{H}(x', \frac{\partial}{\partial x'})\hat{O} \right\} \Psi(x) = 0,$$

откуда, ввиду произвольности в. ф. $\Psi(x)$, следует

$$\hat{O}\hat{H}(x, \frac{\partial}{\partial x}) - \hat{H}(x', \frac{\partial}{\partial x'})\hat{O} = 0. \quad (2)$$

Инвариантность гамильтониана относительно рассматриваемого преобразования означает, что $\hat{H}(x', \frac{\partial}{\partial x'}) = \hat{H}(x, \frac{\partial}{\partial x})$. Поэтому из соотношения (2) непосредственно следует утверждение задачи.

а) В случае преобразования сдвига оператор \hat{O} имеет вид $\hat{O} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{a}\hat{\mathbf{P}}\right)$ (см. 1.12, б). Его коммутативность с \hat{H} эквивалентна условию $[\hat{\mathbf{P}}, \hat{H}] = 0$, означающему сохранение импульса системы ($\hat{\mathbf{P}} = \sum_n \hat{\mathbf{p}}_n$).

б) Для преобразования вращения координат имеем $\hat{O} = \exp(i\varphi_0 \hat{\mathbf{L}})$, где $\hat{\mathbf{L}}$ — оператор суммарного орбитального момента системы частиц (см. 3.1). Коммутативность \hat{O} с \hat{H} , эквивалентная условию $[\hat{\mathbf{L}}, \hat{H}] = 0$, означает сохранение орбитального момента системы.

в) Для преобразования отражения координат $\hat{O}\Psi(\mathbf{r}_n) = \Psi(-\mathbf{r}_n)$, и коммутативность \hat{O} с \hat{H} означает сохранение четности.

Гамильтониан любой замкнутой системы бесспиновых частиц (по поводу частиц со спином см. ниже) инвариантен относительно рассмотренных выше преобразований, и это связано со свойствами свободного пространства: его однородностью, изотропией и эквивалентностью правого и левого (правда, последняя инвариантность и соответственно закон сохранения четности нарушаются так называемыми слабыми взаимодействиями).

Внешнее поле нарушает отмеченные выше свойства свободного пространства. Соответственно гамильтониан системы частиц во внешнем поле не обладает такой высокой степенью симметрии, как у замкнутой системы. Однако отдельные элементы

симметрии и отвечающие им интегралы движения могут иметь место и в этом случае (см. следующую задачу).

В отношении преобразования вращения для системы частиц со спином необходимо сделать следующее замечание. При наличии взаимодействия, зависящего от спина (спин-орбитальное взаимодействие, тензорные силы), гамильтониан системы заведомо не инвариантен относительно преобразования вращения одних лишь пространственных координат, описываемого оператором $\hat{O} = \exp(i\varphi_0 \hat{\mathbf{L}})$. Изотропия пространства в этом случае проявляется в коммутативности оператора *полного* момента системы $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ с гамильтонианом, соответствующей инвариантности гамильтониана системы относительно преобразования, осуществляемого оператором $\hat{R}_{\varphi_0} = \exp(i\varphi_0 \hat{\mathbf{J}})$.

16.10. Согласно предыдущей задаче наличие у системы механических интегралов движения (импульса \mathbf{P} , момента \mathbf{L} , четности I) связано со свойствами инвариантности гамильтониана системы относительно преобразований сдвига, вращения и отражения координат (так, неизменность гамильтониана при сдвиге координат частиц системы вдоль некоторого направления приводит к сохранению проекции суммарного импульса системы на это направление и т. д.).

Гамильтониан системы N частиц во внешнем поле имеет вид

$$\hat{H} = - \sum_{n=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_n} \Delta_n + U_{\text{вз}}(\dots, |\mathbf{r}_{n_1} - \mathbf{r}_{n_2}|, \dots) + U_{\text{вн}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \equiv \hat{H}_0 + U_{\text{вн}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t), \quad (1)$$

где $U_{\text{вз}}$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц системы друг с другом.

Гамильтониан системы в отсутствие внешнего поля \hat{H}_0 имеет наиболее высокую симметрию: он инвариантен относительно произвольного сдвига, вращения и отражения координат (соответственно операторы $\hat{\mathbf{P}}$, $\hat{\mathbf{L}}$, \hat{I} коммутируют с \hat{H}_0 и являются интегралами движения). Внешнее поле нарушает (частично или полностью) эту симметрию, так что именно симметрия потенциальной энергии частиц во внешнем поле

$$U_{\text{вн}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_n U_n(\mathbf{r}_n)$$

определяет симметрию гамильтониана (1) в целом.

В свою очередь симметрия $U_{\text{вн}}$ однозначно определяется характером симметрии «источников» внешнего поля, и для выявления ее следует позаботиться о выборе системы координат, адекватной симметрии рассматриваемой физической системы. При этом симметрия системы проявляется в независимости $U_{\text{вн}}$ от некоторых координат (например, азимутального угла относительно оси симметрии и т. д.).

Имея в виду высказанные соображения, явный вид операторов проекции импульса и момента на некоторую ось (например, ось z):

$$\hat{P}_z = -i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial z_n}, \quad \hat{L}_z = -i \sum_n \frac{\partial}{\partial \varphi_n},$$

где φ — азимутальный угол в плоскости, перпендикулярной оси z , а также сохранение энергии системы в случае $\frac{\partial}{\partial t} U_{\text{вн}} = 0$, легко приходим к следующим заключениям об интегралах движения.

1) Интегралы движения: $E, P_x, P_y, P_z, L_x, L_y, L_z, I$.

Так как для замкнутой системы движения центра масс и относительно независимы, то законы сохранения E, L, I можно несколько детализировать: указанные величины сохраняются не только для движения системы в целом, но и для обоих указанных движений в отдельности.

2) Система обладает аксиальной симметрией относительно оси цилиндра — оси z и трансляционно инвариантна в этом направлении. Соответственно в цилиндрических координатах

$$U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(\rho_n)$$

и интегралами движения являются E, P_z, L_z, I .

3) Система трансляционно инвариантна в любом направлении, параллельном плоскости x, y , создающей внешнее поле, имеет азимутальную симметрию относительно любой оси z , перпендикулярной плоскости x, y , и зеркальную симметрию относительно этой плоскости; соответственно $U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(|z_n|)$.

Интегралы движения: E, P_x, P_y, L_z, I .

4) Система имеет центральную симметрию относительно центра шара; $U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(|\mathbf{r}_n|)$ ($r=0$ — центр шара).

Интегралы движения: E, L_x, L_y, L_z, L^2, I .

5) Система трансляционно инвариантна в направлении оси y , ограничивающей полуплоскость x, y , создающую внешнее поле, и обладает зеркальной симметрией относительно этой плоскости, так что $U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(x_n, |z_n|)$.

Интегралы движения: E, P_y .

6) Система имеет аксиальную симметрию относительно оси z , проходящей через точки — источники внешнего поля; $U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(\rho_n, z_n)$.

Интегралы движения: E, L_z .

В частном случае, когда точки несут одинаковый заряд: $U_n = U_n(\rho_n, |z_n|)$, и поэтому сохраняется также и четность I .

7) Если направление сил, действующих на частицы, зависит от времени, то никаких механических интегралов движения у системы нет. Если же от времени зависят только величины сил, но не их направление (общее для всех частиц системы), то, выбрав ось z вдоль этого направления, имеем $U_{\text{вн}} = - \sum_n F_n(t) z_n$ и соответственно интегралы движения P_x, P_y, L_z .

8) Симметрия системы такая же, как в случае 2):

$$U_{\text{вн}}(t) = f(t) \sum_n U_n(\rho_n).$$

Интегралы движения: P_z, L_z, I .

9) Выбрав оси x, y, z вдоль главных осей эллипсоида, имеем $U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(|x_n|, |y_n|, |z_n|)$.

Интегралы движения: E, I . В случае эллипсоида вращения его ось вращения z является осью аксиальной симметрии и интегралом движения является также L_z .

10) Ось винта — ось z , шаг винта — a , угол поворота вокруг оси — φ .

Функция $U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(\rho_n, z_n, \varphi_n)$ инвариантна относительно преобразования

$$\varphi_n \rightarrow \varphi_n + \delta\alpha, \quad z_n \rightarrow z_n + \frac{a}{2\pi} \delta\alpha$$

(так что при $\delta\alpha = 2\pi$ имеем $\delta z_n = a$) при фиксированных ρ_n :

$$\delta U_{\text{вн}} = \sum_n \left\{ \frac{\partial U_{\text{вн}}}{\partial \varphi_n} \delta\alpha + \frac{\partial U_{\text{вн}}}{\partial z_n} \delta z_n \right\} = \delta\alpha \left\{ \sum_n \frac{\partial}{\partial \varphi_n} + \frac{a}{2\pi} \sum_n \frac{\partial}{\partial z_n} \right\} U_{\text{вн}} = 0.$$

Это означает, что оператор $U_{\text{вн}}$ (а потому и гамильтониан \hat{H}) коммутирует с оператором

$$\sum_n \frac{\partial}{\partial \varphi_n} + \frac{a}{2\pi} \sum_n \frac{\partial}{\partial z_n} = \frac{i}{\hbar} \left(\hbar \hat{L}_z + \frac{a}{2\pi} \hat{P}_z \right).$$

Следовательно, интегралом движения является комбинация $L_z + \frac{a}{2\pi\hbar} P_z$, а также (в силу $\frac{\partial}{\partial t} U_{\text{вн}} = 0$) и энергия E .

11) Выбрав ось z вдоль оси конуса, имеем для однополостного конуса $U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(\rho_n, z_n)$ и интегралы движения E и L_z .

Для двухполостного конуса $U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(\rho_n, |z_n|)$ и интегралом движения является также четность I .

12) Ось тора — ось z , экваториальная плоскость тора — $z = 0$, при этом $U_{\text{вн}} = \sum_n U_n(\rho_n, |z_n|)$.

Интегралы движения: E, L_z, I .

16.11. Воспользовавшись правилом дифференцирования по времени произведения операторов (см. 7.1)

$$\frac{d}{dt}(\hat{f}_1\hat{f}_2) = \left(\frac{d}{dt}\hat{f}_1\right)\hat{f}_2 + \hat{f}_1\frac{d}{dt}\hat{f}_2$$

и учтя, что по условию задачи $\frac{d}{dt}\hat{f}_{1,2} = 0$, находим $\frac{d}{dt}(\hat{f}_1\hat{f}_2) = 0$; аналогично $\frac{d}{dt}(\hat{f}_2\hat{f}_1) = 0$. Таким образом, $\hat{f}_1\hat{f}_2$ и $\hat{f}_2\hat{f}_1$, как и указанные в условии задачи комбинации этих операторов (последние являются эрмитовыми операторами, если \hat{f}_1, \hat{f}_2 эрмитовы), являются интегралами движения.

16.12. Утверждение данной задачи является непосредственным следствием результата предыдущей, так как $\hat{P}_y = i[\hat{P}_x, \hat{J}_z] = = i(\hat{P}_x\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{P}_x)$, и имеет следующий наглядный смысл. Коммутативность \hat{P}_x с гамильтонианом системы \hat{H} (\hat{P}_x — интеграл движения) означает, что для такой системы пространство однородно в направлении оси x ; точно так же коммутативность \hat{J}_z с \hat{H} свидетельствует об аксиальной симметрии пространства относительно оси z (соответственно механические свойства системы не изменяются при ее сдвигах вдоль оси x и поворотах вокруг оси z).

Непосредственным следствием указанных свойств симметрии пространства, как легко сообразить, является его однородность в любом направлении в плоскости x, y (а не только в направлении оси x), что и приводит к сохранению как \hat{P}_x , так и \hat{P}_y .

Рассмотренную в данной задаче симметрию имеет, например, система взаимодействующих друг с другом частиц, находящихся в поле бесконечной однородной плоскости (плоскости x, y), см. задачу 16.10.3.

16.13. Утверждение задачи является непосредственным следствием результата задачи 16.11, так как $\hat{J}_z = -i(\hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x)$, и его связь со свойствами симметрии системы проявляется в следующем (сравнить с предыдущей задачей). Сохранение \hat{J}_x и \hat{J}_y связано с коммутативностью этих операторов с гамильтонианом системы и свидетельствует об аксиальной симметрии рассматриваемой системы относительно осей x и y . Наличие же у системы аксиальной симметрии относительно двух различных пересекающихся осей автоматически приводит к ее аксиальной симметрии также и относительно любой другой оси, имеющей общую точку пересечения с указанными выше осями, и тем самым свидетельствует о центральном характере симметрии системы (неизменности ее свойств при поворотах относительно любой оси, проходящей через центр симметрии).

16.14. В обоих случаях интегралами движения являются: энергия E , проекции полного момента частицы $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ и, соответственно, квадрат момента \mathbf{j}^2 . Кроме того, в случае а) интегралом движения является четность I .

Так как с. ф. гамильтониана можно выбрать также и собственными функциями коммутирующих с ним и друг с другом операторов, то легко сообразить, что независимые в. ф. стационарных состояний частицы в случае *a*) имеют вид

$$\Psi_{E l_1, 2 l_2} = f(r) \Psi_{l_1, 2 l_2}, \quad l_{1, 2} = j \pm 1/2,$$

где $\Psi_{l_1 l_2}$ — известные спин-угловые в. ф. частицы со спином $s = 1/2$ (см. 5.41, 5.42), при этом четность состояния $I = (-1)^{l_{1, 2}}$, а у. Ш. сводится к одномерному уравнению для функции $f(r)$.

В случае *б*) в. ф. стационарных состояний имеют вид

$$\Psi_{E l l_2} = f_1(r) \Psi_{l, l=j+1/2, l_2} + f_2(r) \Psi_{l, l=j-1/2, l_2},$$

а у. Ш. сводится к системе двух линейных дифференциальных уравнений для функций f_1 и f_2 .

16.15. Гамильтониан частицы $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu_0 \mathcal{H} \hat{\sigma}$ в случае *a*) принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} - \mu_0 \mathcal{H}(\rho) \hat{\sigma}_z$$

и интегралами движения являются E, p_z, l_z, s_z, I .

В случае *б*)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} - \mu_0 \mathcal{H}(\rho) (-\sin \varphi \hat{\sigma}_x + \cos \varphi \hat{\sigma}_y)$$

и интегралами движения являются $E, p_z, j_z = l_z + s_z$.

16.16. Учитывая вид гамильтониана $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mathbf{F}_0 \mathbf{r}$, легко находим

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{G}} = \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathbf{G}} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H} \hat{\mathbf{G}}] = -\mathbf{F}_0 - \frac{i}{\hbar} [(\mathbf{F}_0 \mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = 0.$$

Среднее значение оператора $\hat{\mathbf{G}}$, являющегося интегралом движения, не зависит от времени, так что

$$\langle \mathbf{G} \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{G}} \Psi(\mathbf{r}, t) dV = \langle \mathbf{p}(t) \rangle - \mathbf{F}_0 t = \text{const} \equiv \mathbf{p}_0,$$

т. е. $\langle \mathbf{G} \rangle$ равно среднему импульсу частицы в начальный момент времени $t = 0$.

Результат данной задачи является естественным квантово-механическим обобщением результата классической механики, согласно которому при движении в однородном поле вектор $\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}(t) - \mathbf{F}_0 t$ ($\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(0) + \frac{\mathbf{F}_0}{m} t$) является интегралом движения, т. е. не зависит от времени и равен импульсу частицы при $t = 0$.

16.17. Спин пиона $J_\pi = 0$, так что полный момент J двух пионов в с. ц. и. (она же — система покоя частицы A^0) совпадает с моментом L их относительного движения, $J = L$, и он же (в силу сохранения момента) равен спину частицы A^0 : $J_A = J = L$.

Четность системы из двух пионов (в их системе центра инерции)

$$P_{2\pi} = (-1)^L P_\pi P_\pi = (-1)^L = (-1)^{J_A},$$

где $(-1)^L$ — орбитальная четность пары, $P_\pi^2 = +1$ (при этом даже не существенно, что внутренняя четность пиона $P_\pi = -1$). В силу предполагаемого сохранения четности внутренняя четность P_A частицы A^0 должна быть равна $P_A = P_{2\pi} = (-1)^{J_A}$.

Установленное соотношение между спином и четностью частицы A^0 (очевидно, $J_A = L$ — целое число) в случае распада $A^0 \rightarrow \pi^+\pi^-$ представляет единственное ограничение на ее квантовые числа, вытекающее из сохранения четности.

В случае распада $A^0 \rightarrow 2\pi^0$ имеется дополнительное ограничение, связанное с тождественностью π^0 -мезонов. Действительно, в. ф. двух π^0 должна быть симметрична по отношению к перестановке их пространственных координат. Но в с. ц. и. двух π^0 перестановка координат эквивалентна отражению координат и приводит к умножению в. ф. на $(-1)^L$, так что требование неизменности в. ф. ограничивает возможные значения L : $L = 0, 2, 4, \dots$. Соответственно частица A^0 должна иметь четное значение спина и положительную четность.

Таким образом, возможны следующие квантовые числа J_A^P частицы A^0 :

а) $0^+, 1^-, 2^+, 3^-, \dots$; б) $0^+, 2^+, 4^+, \dots$

Если частица A^0 находится в состоянии с определенным значением $J_z = M$, то у распадных пионов $L_z = M$. Фиксирование $J = L$ и $J_z = M$ однозначно определяет угловую зависимость в. ф. двух пионов в виде $Y_{LM}(\mathbf{n})$ ($\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$, \mathbf{p} — относительный импульс пионов). Соответственно угловое распределение продуктов распада $A^0 \rightarrow 2\pi$ имеет вид

$$\frac{d\omega}{d\Omega} = |Y_{LM}(\mathbf{n})|^2.$$

16.18. Пусть частица V находится в состоянии χ_m с определенным значением m проекции спина на некоторую ось z . В силу сохранения момента распадные пионы имеют момент относительного движения $L = J_V = 1$ (спин пиона равен 0) и $L_z = m$, так что угловая зависимость их в. ф. однозначно определена и имеет вид $Y_{1m}(\mathbf{n})$ ($\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$).

Соответственно для состояния частицы V , описываемого спиновой в. ф. вида $\chi = \sum_m c_m \chi_m$ ($\sum_m |c_m|^2 = 1$), угловая зависи-

мость в. ф. распадных пионов имеет вид $\Psi = \sum_m c_m Y_{1m}$, так что их угловое распределение описывается выражением

$$\frac{d\omega}{d\Omega} = \left| \sum_m c_m Y_{1m}(\mathbf{n}) \right|^2 = \sum_{m, m'} c_m c_{m'}^* Y_{1m}(\mathbf{n}) Y_{1m'}^*(\mathbf{n}). \quad (1)$$

Переходя в выражении (1) к поляризованной матрице плотности

$$c_m c_{m'}^* \rightarrow \rho_{mm'} = \overline{c_m c_{m'}^*}$$

и используя явный вид шаровых функций

$$Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1, \pm 1} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi},$$

получаем искомое угловое распределение пионов в распаде $V \rightarrow 2\pi$:

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{d\Omega} = \frac{3}{8\pi} \{ & (\rho_{11} + \rho_{-1, -1}) \sin^2 \theta + 2\rho_{00} \cos^2 \theta - \\ & - 2 \operatorname{Re} \rho_{1, -1} \cos 2\varphi \sin^2 \theta + 2 \operatorname{Im} \rho_{1, -1} \sin 2\varphi \sin^2 \theta - \\ & - \sqrt{2} \operatorname{Re} \rho_{10} \cos \varphi \sin 2\theta + \sqrt{2} \operatorname{Im} \rho_{10} \sin \varphi \sin 2\theta + \\ & + \sqrt{2} \operatorname{Re} \rho_{-10} \cos \varphi \sin 2\theta + \sqrt{2} \operatorname{Im} \rho_{-10} \sin \varphi \sin 2\theta \}, \end{aligned}$$

где θ, φ — полярный и азимутальный углы, определяющие направление импульса одного из пионов распада; $\rho_{11} + \rho_{00} + \rho_{-1, -1} = 1$.

16.19. В условиях задачи квантовые числа исходной системы $\pi^- d$, очевидно, равны: $J = 1$ — полный момент, $P = P_\pi$ — четность, совпадающая с внутренней четностью π^- -мезона. В силу сохранения момента два нейтрона в конечном состоянии также имеют полный момент $J = 1$ (в системе центра инерции), и так как для них $J = L + S$ (L — орбитальный момент относительного движения, S — суммарный спин), то возможны лишь следующие значения квантовых чисел L, S :

$$\begin{aligned} 1) L = 0, S = 1; \quad 2) L = 1, S = 0; \\ 3) L = 1, S = 1; \quad 4) L = 2, S = 1. \end{aligned} \quad (1)$$

Легко, однако, заметить, что условие антисимметричности в. ф. системы из двух нейтронов запрещает им находиться в состояниях с квантовыми числами 1), 2) и 4) в (1). Действительно, спиновые функции, отвечающие $S = 1$ и $S = 0$, соответственно симметричны и антисимметричны относительно перестановки спиновых переменных обоих нейтронов (см. 5.17), а симметрия координатных функций с данным L совпадает с четностью этих функций $(-1)^L$ (поскольку перестановка координат эквивалентна их отражению относительно центра масс).

Соответственно антисимметричной по отношению к перестановке спиновых и пространственных переменных двух нейтронов является в.ф. состояния с квантовыми числами $L=1$, $S=1$. Четность такого состояния отрицательна, и сохранение четности в рассматриваемом процессе позволяет сделать заключение об отрицательной внутренней четности π^- -мезона, т. е. пион — псевдоскалярная частица.

16.20. Так как спин пиона равен нулю, то полный момент системы пионов J совпадает с их орбитальным моментом L и, в силу сохранения момента в распаде, $L=J_\tau=0$. Согласно 10.17 орбитальная четность состояния системы из трех частиц с $L=0$ положительна, и, так как внутренняя четность одного (и вообще нечетного числа) пиона отрицательна, заключаем, что четность состояния системы из трех пионов с равным нулю моментом отрицательна. Такую же внутреннюю четность должна иметь и частица τ , если в распаде $\tau \rightarrow 3\pi$ четность сохраняется. При этом частица τ , очевидно, не может распадаться с сохранением четности на два пиона (сравнить с 16.17). Соответственно существование распадов одновременно на два и три пиона у частицы со спином $J=0$ указывает на нарушение закона сохранения четности в этих распадах (точнее, в одном из них). На опыте такими частицами являются K -мезоны.

16.21. Для решения задачи прежде всего следует установить вид спин-угловой зависимости в.ф. πN -системы с моментом $J=1/2$. Так как спин и четность пиона $J_\pi^P=0^-$, а у нуклона $J_N^P=(1/2)^+$, замечаем, что при данном значении J полного момента πN -системы орбитальный момент L относительного движения может принимать два значения: $L=J \pm 1/2$. При этом четность πN -системы равна $P_{\pi N}=P_\pi P_N (-1)^L = -(-1)^L$, так что фиксирование J и $P_{\pi N}$ однозначно определяет L .

Учитывая сказанное, легко находим, что в случае а) (т. е. при $P_B=-1$) $L=0$, так что в.ф. πN -системы не зависит от углов и ее спин-угловая зависимость имеет тривиальный вид:

$$\Psi_{\pi N} = \chi_N, \quad (1)$$

причем спинор χ_N , описывающий спиновое состояние нуклона, совпадает со спинором χ_B , описывающим спиновое состояние частицы B (точнее, $\chi_N = e^{i\alpha} \chi_B$). Это следует из сохранения момента при распаде:

$$\chi_B^* \hat{J} \chi_B = \frac{1}{2} \chi_B^* \hat{\sigma} \chi_B = \Psi_{\pi N}^* \hat{J} \Psi_{\pi N} = \chi_N^* \left(\hat{L} + \frac{\hat{\sigma}}{2} \right) \chi_N = \frac{1}{2} \chi_N^* \hat{\sigma} \chi_N.$$

Так как в.ф. не зависит от углов, то угловое распределение продуктов распада является изотропным.

В случае б) имеем $L=1$. Вид спин-угловой зависимости в.ф. следует из результата задачи 5.38:

$$\Psi_{\pi N} = C (\hat{\sigma} \mathbf{n}) \chi, \quad \mathbf{n} = \mathbf{p}/p, \quad (2)$$

причем $\chi = e^{i\alpha}\chi_B$. Угловое распределение продуктов распада определяется выражением

$$\frac{d\omega}{d\Omega} \propto \Psi_{\pi N}^* \Psi_{\pi N} = |C|^2 \chi_B^* (\hat{\sigma}\mathbf{n})^2 \chi_B = |C|^2 \chi_B^* \chi_B = |C|^2 = \text{const},$$

т. е., как и в случае *a*), является изотропным.

Наконец, в случае *в*), в силу несохранения четности, четность πN -системы не имеет определенного значения и соответственно спин-угловая зависимость в. ф. представляет суперпозицию в. ф. (1) и (2):

$$\Psi_{\pi N} = (a + b\hat{\sigma}\mathbf{n})\chi_B,$$

а угловое распределение продуктов распада имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{d\Omega} \propto \Psi_{\pi N}^* \Psi_{\pi N} &= \chi_B^* (a^* + b^*\hat{\sigma}\mathbf{n})(a + b\hat{\sigma}\mathbf{n})\chi_B = \\ &= \chi_B^* (|a|^2 + |b|^2 + 2 \text{Re } ab^*\hat{\sigma}\mathbf{n})\chi_B \propto \left(1 + \frac{2 \text{Re } ab^*}{|a|^2 + |b|^2} \langle \sigma \rangle_B \mathbf{n}\right). \end{aligned}$$

Характерным свойством этого распределения является асимметрия вылета «вперед — назад» распадных частиц относительно вектора поляризации $\langle \sigma \rangle_B$ распадающейся частицы *B*. Существование указанной корреляции между направлениями аксиального $\langle \sigma \rangle_B$ и полярного \mathbf{n} векторов, инвариантной относительно отражения координат, как раз и является проявлением несохранения четности в рассматриваемом процессе.

16.22. В случае распада $A \rightarrow 2\pi$ — невозможно, что связано со специфическим свойством двухпионной (и вообще состоящей из двух частиц с равными нулю спинами) системы — однозначной связью момента *J* системы с ее четностью $P_{2\pi} = (-1)^J$ (сравнить с 16.17). Соответственно на основании анализа только углового распределения пионов принципиально невозможно отличить распад частицы *A* со спином *J* и четностью $P = (-1)^J$ на два пиона, идущий с сохранением четности, от распада частицы, имеющей противоположную четность $(-1)^{J+1}$, происходящего с несохранением четности.

В случае распада $B \rightarrow \pi N$ — можно. В этом случае несохранение четности в распаде проявляется в том, что πN -система, вообще говоря, не имеет определенной четности. Соответственно в спин-угловой зависимости в. ф. продуктов распада имеется два слагаемых:

$$\Psi_{\pi N} = \Psi_{\pi N}^{(+)} + \Psi_{\pi N}^{(-)},$$

отвечающих различным четностям (± 1). Интерференция этих слагаемых приводит к асимметрии углового распределения продуктов распада:

$$\frac{d\omega}{d\Omega} \propto \Psi_{\pi N}^* \Psi_{\pi N} = (\Psi_{\pi N}^{(+)*} + \Psi_{\pi N}^{(-)*})(\Psi_{\pi N}^{(+)} + \Psi_{\pi N}^{(-)}),$$

проявляющейся в различии вероятностей вылета «вперед — назад» распадных частиц относительно вектора $\langle J_B \rangle$ — среднего вектора спина распадающейся частицы. Конкретный пример такой асимметрии в случае распада частицы со спином $J = 1/2$ рассмотрен в предыдущей задаче.

16.23. Спиновые состояния γ -квантов определяются их векторами поляризации $e_{1,2}$, удовлетворяющими условию поперечности $e_{1,2} p_{1,2} = 0$, $p_{1,2} = \pm p/2$, где p — относительный импульс квантов в их с.ц.и. (она же — система покоя распадающейся частицы).

Так как в условиях задачи распадные γ -кванты имеют разный нулю полный момент, то их в.ф. не должна изменяться при вращениях координат и, в силу сохранения четности в распаде, должна быть псевдоскалярной функцией при распаде псевдоскалярной частицы и скалярной — при распаде скалярной частицы.

Указанные выше ограничения однозначно определяют спин-угловую зависимость в.ф. распадных γ -квантов в виде:

$$a) \quad \Psi_{2\gamma}(0^-) = C [e_1 e_2] p; \quad б) \quad \Psi_{2\gamma}(0^+) = C (e_1 e_2), \quad (1)$$

откуда автоматически вытекает утверждение задачи.

Отметим, что установленный вид (1) в.ф. системы из двух γ -квантов, являющихся тождественными бозонами, согласуется с условием симметричности их в.ф. по отношению к перестановке частиц, при которой $e_1 \rightarrow e_2$, $e_2 \rightarrow e_1$, $p \rightarrow -p$ ($p = p_1 - p_2$).

16.24. Сначала проведем общее рассмотрение, не пренебрегая спином нуклона. Пусть до столкновения нуклон имеет определенное значение $s_z = \pm 1/2$ проекции спина на ось z , направленную вдоль импульса падающего пиона. Очевидно, что в условиях задачи проекция полного момента J_z , являющаяся интегралом движения, равна $J_z = s_z$, так как проекция орбитального момента относительного движения L_z на направление импульса равна нулю (сравнить с 3.8). Соответственно и в конечном состоянии проекция спина частицы B равна $J_{B,z} = s_z$ (при этом существенно, что отбираются такие события реакции, когда частица B вылетает по или против импульса падающего пиона, так как иначе в конечном состоянии $L'_z \neq 0$). Итак, $J_{B,z} = s_z$. Очевидно, что при переходе в систему покоя частицы B (скорость этой системы направлена вдоль оси z) значение $J_{B,z}$ проекции ее спина сохранится. Таким образом, в системе покоя частица будет характеризоваться значением $J_{B,z} = s_z$ проекции ее спина.

При распаде $B \rightarrow \pi N$ спин-угловая зависимость в.ф. πN -системы однозначно определяется следующими условиями: момент системы равен J_B , проекция момента равна s_z , и четность системы равна четности P_B частицы B . Соответствующие функции $\Psi_{J_B l J_z = s_z}$ были найдены в 5.41 и 5.42, при этом конкретное значение $l = J_B \pm 1/2$ определяется сохранением четности в рас-

паде: $P_B = P_\pi P_N (-1)^l = -(-1)^l$. Угловое распределение продуктов распада: $d\omega = |\Psi_{J_B l s_z}|^2 d\Omega$. Если первоначальный нуклон был не поляризован, то это выражение следует усреднить по s_z , так что оно принимает вид

$$\frac{d\omega}{d\Omega} = \frac{1}{2} \{ |\Psi_{J_B, l, 1/2}|^2 + |\Psi_{J_B, l, -1/2}|^2 \}.$$

В случае $J_B \gg 1$ представляется естественным пренебречь спином нуклона и рассматривать распад $B \rightarrow \pi N$ как распад на две бесспиновые частицы. При этом J_B следует считать целочисленным (т. е. заменить J_B на $J_B \pm 1/2$), а $J_{B,z} = s_z = \pm 1/2$ заменить на $J_{B,z} = 0$. Соответственно угловое распределение продуктов распада в этом приближении принимает вид

$$\frac{d\omega}{d\Omega} \approx |Y_{J_B, 0}(\mathbf{n})|^2 = \frac{2J_B + 1}{4\pi} |P_{J_B}(\cos \theta)|^2. \quad (1)$$

Подставляя в (1) известное асимптотическое выражение для полиномов Лежандра

$$P_l(\cos \theta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi l}} \frac{\sin[(l + 1/2)\theta + \pi/4]}{\sqrt{\sin \theta}}$$

и заменяя в нем быстро осциллирующий множитель $\sin^2[(J_B + 1/2)\theta + \pi/4]$ его средним значением, равным $1/2$, находим искомое распределение:

$$\frac{d\omega}{d\Omega} \approx \frac{1}{2\pi^2 \sin \theta} \quad \left(\int d\omega = 1 \right).$$

16.25. Будем нумеровать индексом i частицы в начальном состоянии, f — в конечном, так что

$$q_{i, f} = Y_{i, f}/2 + T_{3, i, f} \quad (1)$$

Из закона сохранения заряда следует $\sum_i q_i = \sum_f q_f$, а из закона сохранения изотопического спина (точнее, его проекции T_3) — $\sum_i T_{3, i} = \sum_f T_{3, f}$. Имея это в виду, из соотношения (1) легко получаем $\sum_i Y_i = \sum_f Y_f$, что и означает сохранение гиперзаряда.

16.26. Искомый оператор в изопространстве выражается через следующие операторы: единичный 1 , операторы компонент нуклонного изоспина $\hat{\tau}_i$ и пионного \hat{t}_k . Так как операторы $\hat{\tau}$, \hat{t} являются векторными операторами в изопространстве, а искомый оператор должен быть скаляром, то прежде всего выпишем все скалярные комбинации из указанных выше операторов:

$$1, \hat{\tau}^2, (\hat{\tau}^2)^2, \dots, \hat{t}^2, (\hat{t}^2)^2, \dots, (\hat{\tau}\hat{t}), (\hat{\tau}\hat{t})^2, \dots \quad (1)$$

Операторы $\hat{\tau}^2 = 1/2(1 + 1/2)\hat{\tau} = 3/4$, $\hat{t}^2 = 2$ кратны единичному, так что они (как и их степени) дублируют оператор 1, и их можно отдельно не рассматривать. Далее, легко заметить, что с. з. оператора $\hat{\tau}\hat{t}$ равны

$$\text{с. з. } (\hat{\tau}\hat{t}) = \begin{cases} -1 & (\text{в состоянии с } T = 1/2), \\ 1/2 & (\text{в состоянии с } T = 3/2), \end{cases} \quad (2)$$

где T — значение суммарного изоспина πN -системы (сравнить с 3.34). Так как оператор $(\hat{\tau}\hat{t})$ имеет лишь два различных с. з., то согласно 1.27 имеем

$$(\hat{\tau}\hat{t})^2 = 1/2 (1 - \hat{\tau}\hat{t}),$$

так что $(\hat{\tau}\hat{t})^n$ при $n \geq 2$ линейно выражается через 1 и $\hat{\tau}\hat{t}$.

Таким образом, из всех изоскалярных операторов (1), через которые должен выражаться искомый оператор, линейно независимыми являются лишь 1 и $\hat{\tau}\hat{t}$, так что

$$\hat{U} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 (\hat{\tau}\hat{t}), \quad (3)$$

где $\hat{V}_{1,2}$ — операторы в конфигурационном пространстве, не зависящие от изоспиновых переменных.

Имея в виду (2) и (3), легко найти операторы $\hat{U}(T)$ пион-нуклонного взаимодействия в состояниях с определенными значениями $T = 1/2, 3/2$ суммарного изоспина:

$$\hat{U}(T = 1/2) = \hat{V}_1 - \hat{V}_2, \quad \hat{U}(T = 3/2) = \hat{V}_1 + 1/2 \hat{V}_2,$$

а также выразить оператор (3) через $\hat{U}(T)$:

$$\hat{U} = \frac{\hat{U}(T = 1/2) + 2\hat{U}(T = 3/2)}{3} - \frac{2[\hat{U}(T = 1/2) - \hat{U}(T = 3/2)]}{3} (\hat{\tau}\hat{t}).$$

16.27. Задача решается по образцу предыдущей. Внешнее различие проявляется в том, что оператор $(\hat{t}_1\hat{t}_2)$ ($\hat{t}_{1,2}$ — операторы изоспина 1-го и 2-го пионов) теперь имеет три различных с. з.:

$$\text{с. з. } (\hat{t}_1\hat{t}_2) = \begin{cases} 1 & (\text{в состоянии с } T = 2), \\ -1 & (\text{в состоянии с } T = 1), \\ -2 & (\text{в состоянии с } T = 0), \end{cases}$$

так что независимыми операторами являются 1, $\hat{t}_1\hat{t}_2$, $(\hat{t}_1\hat{t}_2)^2$ (при этом $(\hat{t}_1\hat{t}_2)^3 = 2 + (\hat{t}_1\hat{t}_2) - 2(\hat{t}_1\hat{t}_2)^2$). Соответственно искомый оператор $\pi\pi$ -взаимодействия в изопространстве имеет вид

$$\hat{U} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 (\hat{t}_1\hat{t}_2) + \hat{V}_3 (\hat{t}_1\hat{t}_2)^2,$$

Операторы взаимодействия пионов в состояниях с определенным значением изоспина:

$$\begin{aligned}\hat{U}(T=0) &= \hat{V}_1 - 2\hat{V}_2 + 4\hat{V}_3, & \hat{U}(T=1) &= \hat{V}_1 - \hat{V}_2 + \hat{V}_3, \\ \hat{U}(T=2) &= \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3.\end{aligned}$$

Наконец, $\hat{U} = 1/3 [-\hat{U}(T=0) + 3\hat{U}(T=1) + \hat{U}(T=2)] - 1/2 [\hat{U}(T=1) - \hat{U}(T=2)](\hat{t}_1\hat{t}_2) + 1/6 [2\hat{U}(T=0) - 3\hat{U}(T=1) + \hat{U}(T=2)](\hat{t}_1\hat{t}_2)^2$.

16.28. Имея в виду, что оператор заряда пиона связан с оператором его t_3 -компоненты изоспина соотношением $\hat{q}_\pi = e\hat{t}_3$ ($e > 0$), легко сообразить, что искомый оператор кулоновского взаимодействия двух пионов имеет вид

$$\hat{V}_{\text{кул}} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \hat{t}_3^{(1)} \hat{t}_3^{(2)}.$$

16.29. Учитывая связь операторов заряда пиона и нуклона с операторами их t_3 -компонент изоспина ($e > 0$):

$$\hat{q}_N = \frac{e}{2}(1 + 2\hat{t}_3), \quad \hat{q}_\pi = e\hat{t}_3,$$

нетрудно сообразить, что искомый оператор имеет вид

$$\hat{V}_{\text{кул}} = \frac{e^2}{2|\mathbf{r}_\pi - \mathbf{r}_N|} (1 + 2\hat{t}_3) \hat{t}_3.$$

16.30. Так как для двухпионной системы перестановка координат пионов эквивалентна их отражению относительно центра масс, то симметрия координатной волновой функции состояния с данным значением момента относительного движения L (он же — полный момент $J = L$) совпадает с ее четностью $(-1)^L$. В.ф. двух пионов — тождественных бозонов — должна быть симметрична по отношению к перестановке их переменных: координат и изотопических переменных. Поэтому в состоянии с данным L изоспиновая часть в.ф. пионов должна быть симметричной для четных значений L и антисимметричной для нечетных L .

Учитывая значение изоспина пиона $T=1$ и формальную аналогию свойств момента и изоспина (в том числе и в вопросах сложения изоспина), на основании результата задачи 3.39 заключаем, что изоспиновая часть системы из двух пионов по отношению к их перестановке симметрична при суммарном изоспине $T=0$; 2 и антисимметрична при $T=1$. Соответственно в состояниях с четным L возможны лишь значения $T=0$; 2, при нечетных L — лишь $T=1$.

16.31. Имея в виду аналогию свойств момента и изоспина и учитывая симметричность изоспиновой части волновой функции двухпионной системы из двух π^0 -мезонов, на основании результата задачи 3.39 заключаем, что суммарный изоспин двух

π^0 может принимать лишь два значения: $T = 0$ и $T = 2$ (в. ф. состояния с $T = 1$ антисимметрична по отношению к перестановке изоспиновых переменных пионов), так что

$$\overline{T^2} = \sum_T T(T+1) \omega(T) = 6\omega(T=2). \quad (1)$$

С другой стороны, основываясь на результате задачи 3.37, имеем

$$\overline{T^2} = 2t_\pi(t_\pi + 1) + 2(t_3^{(1)})_{\pi^0}(t_3^{(2)})_{\pi^0} = 4. \quad (2)$$

Из (1) и (2) следует: $\omega(T=2) = 2/3$, $\omega(T=0) = 1/3$.

16.32. В рассматриваемых состояниях πN -системы t_3 -компоненты изоспина нуклона и пиона имеют определенные значения (напомним: $(t_3)_p = 1/2$, $(t_3)_n = -1/2$, $(t_3)_{\pi^+} = 1$, $(t_3)_{\pi^0} = 0$, $(t_3)_{\pi^-} = -1$). Поэтому, учитывая формальную аналогию свойств момента и изоспина и результат задачи 3.37, имеем

$$\overline{T^2} = t_N(t_N + 1) + t_\pi(t_\pi + 1) + 2(t_3)_\pi(t_3)_N = 11/4 + 2(t_3)_\pi(t_3)_N. \quad (1)$$

С другой стороны, для πN -системы возможны лишь два значения суммарного изоспина: $T = 1/2$ и $T = 3/2$, так что, обозначив $\omega(1/2)$ вероятность значения $T = 1/2$ в рассматриваемых состояниях (при этом $\omega(3/2) = 1 - \omega(1/2)$), имеем

$$\overline{T^2} = \sum_T T(T+1) \omega(T) = 15/4 - 3\omega(1/2). \quad (2)$$

Используя (1) и (2), легко находим:

а) для π^+p - и π^-n -систем: $\overline{T^2} = 15/4$, $\omega(3/2) = 1$ (заранее очевидный результат);

б) для π^+n - и π^-p -систем: $\overline{T^2} = 7/4$, $\omega(1/2) = 2/3$, $\omega(3/2) = 1/3$;

в) для π^0p - и π^0n -систем: $\overline{T^2} = 11/4$, $\omega(1/2) = 1/3$, $\omega(3/2) = 2/3$.

16.33. Задачу можно решить различными способами. Например, учитывая аналогию свойств момента и изоспина, можно воспользоваться коэффициентами Клебша — Гордана. Для случая сложения двух одинаковых моментов в результирующий момент, равный нулю, они были фактически найдены в 3.46. В применении к рассматриваемой задаче результат задачи 3.46 дает

$$\Psi_{T=0}(2\pi) = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \psi_1(1) \psi_{-1}(2) - \psi_0(1) \psi_0(2) + \psi_{-1}(1) \psi_1(2) \}. \quad (1)$$

Здесь $\Psi_{T=0}(2\pi)$ — изоспиновая в. ф. состояния двух пионов с $T = 0$, $\psi_{t_3}(1, 2)$ — изоспиновые в. ф. отдельных пионов с определенным значением компоненты t_3 изоспина ($t_3 = 1, 0, -1$).

Вероятности распада i^0 в различные зарядовые состояния двухпионной системы ($\pi^+\pi^-$ и $2\pi^0$) пропорциональны вероятностям нахождения пионов в таких состояниях при $T = 0$ (в силу

сохранения изоспина в распаде). Согласно (1) вероятность зарядового состояния из двух π^0 равна $\omega_{T=0}(2\pi^0) = (1/\sqrt{3})^2 = 1/3$ (напомним, что π^0 -мезону соответствует изоспиновая в.ф. пиона с $t_3 = 0$), соответственно $\omega_{T=0}(\pi^+\pi^-) = 2/3$, так что

$$\frac{\omega(f^0 \rightarrow \pi^+\pi^-)}{\omega(f^0 \rightarrow 2\pi^0)} = 2. \quad (2)$$

Приведем еще два способа решения.

1) Рассмотрим распад некоторого числа N частиц f^0 . В результате их распада образуются $N\omega(f^0 \rightarrow \pi^+\pi^-)$ π^+ -мезонов, столько же π^- и $2N\omega(f^0 \rightarrow 2\pi^0)$ π^0 -мезонов (в распаде $f^0 \rightarrow 2\pi^0$ образуются сразу два π^0). Исходная система из f^0 является, очевидно, изотопически симметричной (так как $T_3 = 0$). Также изотопически симметричным должно быть конечное состояние, включающее распадные пионы. Отражением этой симметрии должно быть одинаковое число пионов в различных зарядовых состояниях π^+ , π^0 , π^- , что немедленно приводит к установленному выше соотношению (2).

Приведенное решение представляется очень наглядным с физической точки зрения. Оно может быть обобщено и на случаи более сложных распадов и реакций (см., например, 16.35).

2) Воспользуемся результатом задачи 1.48, согласно которому $|\Psi_A(B)|^2 = |\Psi_B(A)|^2$ (обозначения задачи 1.48). Будем понимать под B операторы $t_3^{(1,2)}$ -компонент изоспина двух пионов, а под A — операторы квадрата суммарного изоспина пионов $\hat{\mathbf{T}}^2$ и его \hat{T}_3 -компоненты. Приведенное соотношение при этом принимает вид

$$|\Psi_{T, t_3^{(1)}, t_3^{(2)}}|^2 = |\Psi_{t_3^{(1)}, t_3^{(2)}}(T, T_3)|^2. \quad (3)$$

Положив в (3) $T = 0$, $t_3^{(1)} = t_3^{(2)} = 0$, перепишем это соотношение в виде $\omega_{T=0}(2\pi^0) = \omega_{2\pi^0}(T=0) = 1/3$, где мы учли значение вероятности суммарного изоспина $T = 0$ в системе из двух π^0 , полученное в 16.31.

В соответствии со сказанным ранее найденное значение $\omega_{T=0}(2\pi^0) = 1/3$ приводит к соотношению (2). Таким образом, последний способ решения основан на возможности вычисления в ряде случаев коэффициентов Клебша — Гордана (точнее, их квадратов) с помощью соотношения (3).

16.34. Изоспиновую часть в.ф. трехпионного состояния с $T(3\pi) = 0$ легко найти, если учесть следующие обстоятельства:

- 1) формальную аналогию свойств момента и изоспина;
- 2) возможность описания изотопического состояния отдельного пиона, имеющего $t_\pi = 1$, с помощью вектора \mathbf{f} в изотопическом пространстве (при этом связь векторного представления с обычно используемым t_3 -представлением такая же, как и в случае момента, см. 3.67; так, пион в зарядовом состоянии π^0 ,

т. е. с $t_3 = 0$, описывается в изопространстве вектором φ_{π^0} с компонентами $\varphi_{\pi^0} = (0, 0, 1)$);

3) в. ф. состояния с изоспином $T = 0$ является скаляром (или псевдоскаляром) в изотопическом пространстве;

4) из трех векторов φ_a , описывающих изоспиновые состояния отдельных пионов, можно построить лишь одну скалярную (точнее, псевдоскалярную) изоспиновую в. ф. трехпионной системы:

$$\Psi_{T=0}(3\pi) = \varphi_1 [\varphi_2 \varphi_3] = \varepsilon_{ikl} \varphi_{1i} \varphi_{2k} \varphi_{3l}. \quad (1)$$

Найденная изоспиновая в. ф., отвечающая значению $T(3\pi) = 0$, очевидно, антисимметрична по отношению к перестановке изоспиновых переменных любых двух пионов.

Так как изоспиновая в. ф. системы из трех π^0 , очевидно, симметрична по отношению к их перестановке, то антисимметричная в. ф. (1) не содержит слагаемого, отвечающего всем трем пионам в зарядовом состоянии π^0 , что и доказывает невозможность распада, указанного в условии задачи.

16.35. Распады Δ^{++} , Δ^- происходят по одному каналу: $\Delta^{++} \rightarrow \pi^+ p$, $\Delta^- \rightarrow \pi^- p$, а распады Δ^+ , Δ^0 — по двум. Так,

$$\Delta^+ \rightarrow \begin{cases} \pi^+ p, \\ \pi^0 p. \end{cases} \quad (1)$$

Для нахождения относительных вероятностей распада Δ^+ по этим каналам следует учесть, что, в силу сохранения изоспина, распадающая πN -система находится в изотопическом состоянии с $T = 3/2$, $T_3 = 1/2$ и ее изоспиновая в. ф. может быть представлена в виде

$$\Psi_{T=3/2, T_3=1/2} = C_1 \psi_1(\pi) \psi_{-1/2}(N) + C_2 \psi_0(\pi) \psi_{1/2}(N),$$

где $\psi_{t_3}(\pi(N))$ — нормированные изоспиновые в. ф. пиона (нуклона) в состоянии с определенным значением t_3 -компоненты изоспина. Зарядовым состояниям π^+ , π^0 , π^- -пионов соответствуют значения $t_3 = 1, 0, -1$; для протона и нейтрона $t_3 = 1/2, -1/2$. Величины $|C_1|^2$ и $|C_2|^2$ определяют вероятности различных зарядовых состояний (соответственно $\pi^+ p$ и $\pi^0 p$) пион-нуклонной системы, а тем самым и вероятности распада Δ^+ по каналам (1).

Учитывая аналогию свойств момента и изоспина, замечаем, что $C_{1,2}$ представляют фактически соответствующие коэффициенты Клебша — Гордана, и их значения легко могут быть найдены по известным формулам для этих коэффициентов. Мы, однако, приведем два способа расчета $|C_{1,2}|^2$, не требующие знания самих этих коэффициентов.

1-й способ основан на использовании равенства

$$\begin{aligned} \omega_{TT, (t_3^{(1)}, t_3^{(2)})} &\equiv |\Psi_{TT, (t_3^{(1)}, t_3^{(2)})}|^2 = |\Psi_{t_3^{(1)}, t_3^{(2)}}(T, T_3)|^2 = \\ &= \omega_{t_3^{(1)}, t_3^{(2)}}(T, T_3) \end{aligned} \quad (2)$$

(см. (16.33)), согласно которому вероятность некоторого зарядового состояния, определяемого квантовыми числами $t_3^{(1)}, t_3^{(2)}$, в состоянии системы с данными значениями T и $T_3 = t_3^{(1)} + t_3^{(2)}$ равна вероятности суммарного значения T изоспина в состоянии системы, характеризующемся квантовыми числами $t_3^{(1)}, t_3^{(2)}$ (в этом смысле равенство (2) можно назвать «соотношением взаимности»). Для рассматриваемой πN -системы значения правой части (2) для различных зарядовых состояний были найдены в 16.32. Имея это в виду, легко находим $|C_1|^2 \equiv \omega_{T=3/2}(\pi^+ n) = \omega_{\pi^+ n}(T=3/2) = 1/3$ и т. д., так что

$$\frac{\omega(\Delta^+ \rightarrow \pi^+ n)}{\omega(\Delta^+ \rightarrow \pi^0 p)} = \frac{\omega(\Delta^0 \rightarrow \pi^- p)}{\omega(\Delta^0 \rightarrow \pi^0 n)} = \frac{1}{2}. \quad (3)$$

2-й способ основан на наглядных физических соображениях. Выпишем возможные каналы распада различных зарядовых состояний частицы Δ с указанием их относительной вероятности ($\omega_1 + \omega_2 = 1$):

$$\begin{aligned} \Delta^{++} &\rightarrow \pi^+ p, & \Delta^- &\rightarrow \pi^- n, \\ \Delta^+ &\rightarrow \begin{cases} \pi^+ n, & \omega_1, \\ \pi^0 p, & \omega_2, \end{cases} & \Delta^0 &\rightarrow \begin{cases} \pi^- p, & \omega_1, \\ \pi^0 n, & \omega_2. \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

При составлении (4) учтено, что вероятности двух распадов, один из которых является зеркальным отражением другого в изопространстве, одинаковы (при таком отражении все частицы в реакции, имеющие некоторые t_3 -компоненты изоспина, заменяются на их партнеров по изомультиплету с противоположным значением t_3); так, $\omega(\Delta^+ \rightarrow \pi^+ n) = \omega(\Delta^0 \rightarrow \pi^- p)$.

Рассмотрим изотопически неполяризованный пучок частиц Δ , в котором все зарядовые состояния Δ представлены в одинаковом количестве N_0 . Среди продуктов распада — пионов и нуклонов — различные зарядовые состояния пионов будут представлены в следующем количестве: $N(\pi^+) = N(\pi^-) = N_0(1 + \omega_1)$, $N(\pi^0) = 2N_0\omega_2 = 2N_0(1 - \omega_1)$. Из физических соображений представляется очевидным, что пучок распадных пионов в изопространстве также будет неполяризованным, так что различные зарядовые состояния пиона будут в нем представлены одинаково: $N(\pi^+) = N(\pi^0) = N(\pi^-)$. Это условие дает $\omega_1 = 1/3$ и приводит к установленному выше другим способом соотношению (3). Отметим, что при этом пучок распадных нуклонов также является неполяризованным, т. е. $N(p) = N(n)$.

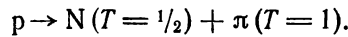
16.36. Задача решается аналогично предыдущей. Приведем ответ:

$$\frac{w(N^{*+} \rightarrow \pi^+ n)}{w(N^{*+} \rightarrow \pi^0 p)} = \frac{w(N^{*0} \rightarrow \pi^- p)}{w(N^{*0} \rightarrow \pi^0 n)} = 2.$$

16.37. Поскольку $T_d = 0$, $T_\pi = 1$, то конечные состояния обеих реакций являются различными изоспиновыми состояниями одной и той же физической системы (пион + дейтрон) с изоспином $T = 1$, отличающимися лишь значением T_3 -компоненты изоспина. В силу сохранения изоспина рассматриваемые реакции происходят лишь в состояниях начальной нуклон-нуклонной системы с изоспином $T = 1$. При этом в реакции $pp \rightarrow d\pi^+$ оба нуклона находятся как раз в требуемом изотопическом состоянии с $T = 1$ (и $T_3 = 1$), в то время как в реакции $pn \rightarrow d\pi^0$ требуемое состояние двух нуклонов с $T = 1$ (и $T_3 = 0$) представлено, очевидно, с вероятностью $1/2$ (с такой же вероятностью $1/2$ представлено состояние с $T = 0$, $T_3 = 0$).

По условию отбора сечений $d\sigma$ обе реакции совершенно одинаковы в смысле координатных и спиновых степеней свободы, так что в силу изотопической инвариантности отношение их сечений равно отношению вероятностей необходимого изотопического состояния с $T = 1$ в начальных состояниях, т. е. двум, что и требовалось доказать.

16.38. Так как $T_d = 0$, то в смысле изоспина дейтрон в рассматриваемых реакциях играет роль «катализатора» в процессе «диссоциации» протона p на нуклон и пион:



В начальной стадии процесса $T = 1/2$, $T_3 = 1/2$, и в силу сохранения изоспина такие же значения T и T_3 имеет пион-нуклонная система в конечном состоянии. По условию отбора сечений $d\sigma$ обе реакции совершенно одинаковы в смысле координатных и спиновых степеней свободы, так что в силу изотопической инвариантности отношение их сечений равно отношению «весов» зарядовых состояний $p\pi^+$ и $p\pi^0$ пион-нуклонной системы в состоянии с $T = 1/2$ и $T_3 = 1/2$. Последнее отношение равно 2, что и доказывает утверждение задачи (сравнить с решением задач 16.35 и 16.36).

16.39. Обозначим $d\sigma(I)$, $d\sigma(II)$, $d\sigma(III)$ дифференциальные сечения рассматриваемых реакций.

Реакции (II) и (III) представляют два канала единой (в отношении изоспина) реакции $\pi^- p \rightarrow \pi N$, отличающиеся различными зарядовыми состояниями пион-нуклонной системы в конечном состоянии, изоспин которой по условию задачи равен $T = 3/2$. Сравним $(d\sigma(II) + d\sigma(III))$ с $d\sigma(I)$. По условию отбора сечений $d\sigma$ рассматриваемые реакции совершенно одинаковы в смысле координатных и спиновых степеней свободы, и в силу изотопической инвариантности (с учетом предполагаемой доми-

вирующей роли состояний с $T = 3/2$ в πN -взаимодействии) отношение сечений $(d\sigma(\text{II}) + d\sigma(\text{III})) : d\sigma(\text{I})$ равно отношению «весов» необходимого изотопического состояния с $T = 3/2$ в начальных состояниях π^-p и π^+p пион-нуклонной системы. Указанные «веса» равны: 1 в случае π^+p - и $1/3$ в случае π^-p -системы (сравнить с 16.35), так что

$$(d\sigma(\text{II}) + d\sigma(\text{III})) : d\sigma(\text{I}) = 1 : 3. \quad (1)$$

Найдем отношение $d\sigma(\text{II}) : d\sigma(\text{III})$. Оно равно отношению «весов» зарядовых состояний π^0p и π^-p пион-нуклонной системы в состоянии с $T = 3/2$ (и $T_3 = -1/2$) и составляет 2 (сравнить с результатом 16.35), т. е.

$$d\sigma(\text{II}) : d\sigma(\text{III}) = 2 : 1. \quad (2)$$

Из (1) и (2) следует искомое соотношение:

$$d\sigma(\text{I}) : d\sigma(\text{II}) : d\sigma(\text{III}) = 9 : 2 : 1.$$

16.40. В силу зарядовой симметрии вероятности перехода, дифференциальные сечения и т. д. для двух процессов, связанных друг с другом с помощью замен $p \rightarrow n$, $n \rightarrow p$, $\pi^+ \rightarrow \pi^-$, $\pi^- \rightarrow \pi^+$, $\pi^0 \rightarrow \pi^0$, равны (в изопространстве такие два процесса являются зеркальным отражением друг друга относительно плоскости, перпендикулярной оси T_3).

Основанное на зарядовой симметрии соотношение между дифференциальными сечениями рассматриваемых процессов представляется очевидным. Обратим внимание лишь на следующее обстоятельство: указанные выше замены частиц их изотопическими партнерами должны, естественно, производиться на обеих стадиях процесса — начальной и конечной. Применительно к рассматриваемым реакциям это означает, что импульсные и спиновые характеристики протона и нейтрона в начальных состояниях обеих реакций должны быть взаимно заменены.

ДОПОЛНЕНИЕ

1. Линейный гармонический осциллятор

Решение у. Ш. для линейного осциллятора

$$\hat{H}\Psi_n \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_n''(x) + \frac{kx^2}{2}\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)$$

дает энергетические уровни $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, $\omega = \sqrt{k/m}$ и соответствующие им нормированные в. ф. стационарных состояний

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

где $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$, $H_n(z)$ — полиномы Эрмита.

Приведем несколько первых полиномов Эрмита:

$$H_0(z) = 1, \quad H_1(z) = 2z, \quad H_2(z) = 4z^2 - 2.$$

2. Шаровые функции

Шаровые функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ являются нормированными с. ф. операторов квадрата орбитального момента частицы \hat{I}^2 и его проекции \hat{I}_z на ось z :

$$\hat{I}^2 Y_{lm} \equiv -\left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm},$$

$$\hat{I}_z Y_{lm} \equiv -i \frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{lm} = m Y_{lm},$$

и имеют вид *)

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

где P_l и $P_l^{|m|}$ — соответственно полиномы Лежандра и присоединенные функции Лежандра.

*) Фазовый множитель, принятый в определении шаровых функций, такой же, как в книге [3].

Несколько первых шаровых функций имеют вид

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta),$$

$$Y_{1, \pm 1} = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2, \pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \quad Y_{2, \pm 2} = - \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}.$$

3. Частица в кулоновском поле (водородоподобный атом)

Нормированные в. ф. стационарных состояний д. с. в кулоновском поле притяжения $U = - (\alpha/r)$ ($\alpha > 0$) могут быть представлены в виде $\Psi_{n_r l m} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (n_r — радиальное квантовое число, $n = n_r + l + 1$ — главное квантовое число), где радиальная часть в. ф. дается выражением ($a = \hbar^2/m\alpha$)

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

($L_n^k(z)$ — обобщенные полиномы Лагерра); энергия состояния $E_n = - \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}$.

Радиальные части в. ф. нескольких нижних состояний имеют вид

$$R_{10} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a} \quad (\text{основное, } 1s\text{-состояние}),$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}a^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} \quad (2s\text{-состояние}),$$

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}a^{3/2}} \frac{r}{a} e^{-r/2a} \quad (2p\text{-состояние}).$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. — М.: Высшая школа, 1976.
2. Давыдов А. С. Квантовая механика. — М.: Наука, 1973.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. — М.: Наука, 1973.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. — М.: Наука, 1973.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. — М.: Наука, 1976.
7. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. — М.: Наука, 1969.
8. Престон М. Физика ядра. — М.: Мир, 1964.
9. Коган В. И., Галицкий В. М. Сборник задач по квантовой механике. — М.: Гостехиздат, 1956.
10. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. Сборник задач по квантовой механике. — М.: Гостехиздат, 1957.
11. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. — М.: Мир, 1974, т. т. 1, 2.
12. Лебедев Н. Н. Специальные функции и их приложения. — М.: Физматгиз, 1963.
13. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. — М.: Физматгиз, 1962.