

А.Л. Барабанов

**КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА**  
**(КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ)**

**Часть 2**

2-я редакция (2015 год)  
исправлены замеченные опечатки,  
внесены незначительные изменения

Москва 2005

В этой книге представлен конспект лекций по курсу квантовой механики, прочитанных мной в весеннем (часть 1) и осеннем (часть 2) семестрах 2004 года студентам факультета физической и квантовой электроники Московского физико-технического института. По построению и кругу обсуждаемых вопросов этот курс примерно соответствует годовым курсам квантовой механики, читаемых на других факультетах МФТИ.

Идея создания конспекта лекций принадлежит студенту группы 154 А.В. Шелаеву. Он же, Артем Шелаев, выполнил основную часть работы по составлению конспекта (включая набор формул и создание рисунков в пакете  $\text{\LaTeX}$ ). Со своей стороны я не только внимательно прочел представленные Артемом тексты, но также исправил их, дополнил (стараясь не выходить за рамки заданного жанра – конспект) и отредактировал. Поэтому я несу полную ответственность за все формулировки в этой книге и, разумеется, за все возможные оплошности и опечатки. Буду признателен всем, кто пришлет мне свои замечания по адресу `a_l_barabanov@mail.ru`.

Я очень благодарен Артему Шелаеву, без инициативы которого эта книга не появилась бы, а также всем, кто ему помогал. Я также очень признателен всем своим коллегам по кафедре теоретической физики МФТИ за многочисленные обсуждения проблем квантовой механики и вопросов, связанных с ее изложением, в особенности, Б.В. Гешкенбейну, С.А. Гордонинову, Г.С. Ирошникову, Л.П. Котовой, В.П. Кузнецову, В.И. Манько, Д.Л. Осипову, В.П. Смильге, А.И. Тернову, С.В. Толоконникову, С.В. Фомичеву. Отдельно хотелось бы выразить благодарность С.П. Аллилуеву и Ю.М. Белоусову — не только за поддержку и вдохновляющие дискуссии, но и за последовательное утверждение на кафедре творческой и доброжелательной атмосферы. Особая признательность — Н.Н. Пастушковой — за неоценимый вклад в образ и стиль жизни кафедры теоретической физики МФТИ.

*Добавление ко 2-й редакции:* Спасибо всем, кто указал на опечатки. Их оказалось сравнительно немного, и поэтому я сомневался, нужно ли править старый текст. Не проще ли написать новый, ведь многие разделы курса я рассказываю теперь иначе? В конце концов я осознал, что одно другому не противоречит. Новый текст готовить нужно, но в этом старом конспекте есть своя логика, и пусть он будет по возможности точным.

А.Л. Барабанов

© А.Л. Барабанов, 2005, 2015

# Содержание

<b>1</b>	<b>Стационарная теория возмущений</b>	<b>6</b>
1.1	Постановка задачи . . . . .	6
1.2	Случай невырожденного спектра . . . . .	7
1.3	Случай вырожденного спектра . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Нестационарная теория возмущений</b>	<b>11</b>
2.1	Постановка задачи . . . . .	11
2.2	Внезапное возмущение . . . . .	11
2.3	Обобщение на случай произвольного $\tau$ . . . . .	13
2.4	Возмущение, действующее в течение конечного времени	15
2.5	Периодическое возмущение . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Релятивистские квантовые уравнения</b>	<b>19</b>
3.1	Нерелятивистское уравнение Шредингера . . . . .	19
3.2	Уравнение Клейна–Гордона . . . . .	19
3.3	Уравнение Дирака . . . . .	21
3.4	Матрицы Дирака . . . . .	22
3.5	Плотность тока вероятности в теории Дирака . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Уравнения Дирака и Паули</b>	<b>26</b>
4.1	Решение уравнения Дирака для свободной частицы . . . . .	26
4.2	Уравнение Дирака для частицы во внешнем поле . . . . .	29
4.3	Уравнение Паули . . . . .	30
<b>5</b>	<b>Релятивистские поправки второго порядка по <math>v/c</math></b>	<b>34</b>
5.1	Постановка задачи . . . . .	34
5.2	Уравнение для спинора $\phi$ . . . . .	34
5.3	Уравнение для спинора $\phi$ , нормированного на единицу . . . . .	36
5.4	Физический смысл поправок второго порядка по $v/c$ . . . . .	39
<b>6</b>	<b>Сложение угловых моментов</b>	<b>42</b>
6.1	Частица в центральном поле . . . . .	42
6.2	Постановка общей задачи . . . . .	44
6.3	Коэффициенты Клебша–Гордана . . . . .	45
6.4	Пример: сложение моментов $1/2$ и $1/2$ . . . . .	47
<b>7</b>	<b>Тождественные частицы. Гелиеподобный атом</b>	<b>50</b>
7.1	Симметрия волновой функции тождественных частиц . . . . .	50
7.2	Гелиеподобный атом . . . . .	51

<b>8</b>	<b>Сложный атом</b>	<b>55</b>
8.1	Вариационный метод . . . . .	55
8.2	Основное состояние гелиеподобного атома . . . . .	57
8.3	Метод Хартри . . . . .	57
8.4	Метод Хартри–Фока . . . . .	59
8.5	Атомные оболочки . . . . .	60
8.6	Термы атома . . . . .	61
8.7	Тонкая структура термов . . . . .	62
<b>9</b>	<b>Атом в магнитном поле</b>	<b>63</b>
9.1	Гамильтониан сложного атома в магнитном поле . . . . .	63
9.2	Слабое поле (эффект Зеемана) . . . . .	64
9.3	Сильное поле (эффект Пашена–Бака) . . . . .	67
9.4	Диамагнетизм инертных газов . . . . .	68
<b>10</b>	<b>Основы квантовой теории излучения</b>	<b>69</b>
10.1	Квантовое описание свободного электромагнитного поля . . . . .	69
10.2	Атом в классическом электромагнитном поле . . . . .	70
10.3	Квантовое описание взаимодействия атома и поля . . . . .	71
<b>11</b>	<b>Спонтанное излучение атома</b>	<b>73</b>
11.1	Постановка задачи . . . . .	73
11.2	Оператор взаимодействия атома и поля . . . . .	74
11.3	Плотность конечных состояний . . . . .	74
11.4	Вероятность излучения фотона в дипольном приближении . . . . .	75
11.5	Суммирование по поляризациям . . . . .	77
11.6	Время жизни состояния . . . . .	78
<b>12</b>	<b>Интегральное уравнение теории рассеяния</b>	<b>78</b>
12.1	Постановка задачи рассеяния . . . . .	78
12.2	Дифференциальное сечение упругого рассеяния . . . . .	79
12.3	Функция Грина задачи рассеяния . . . . .	80
12.4	Интегральное уравнение рассеяния . . . . .	83
12.5	Борновское приближение . . . . .	84
<b>13</b>	<b>Метод парциальных волн</b>	<b>85</b>
13.1	Идея метода . . . . .	85
13.2	Сферические функции Бесселя, Неймана и Ганкеля . . . . .	88
13.3	Явное выражение для амплитуды рассеяния . . . . .	90

<b>14 Неупругое взаимодействие. Оптическая теорема</b>	<b>92</b>
14.1 Полное сечение упругого рассеяния . . . . .	92
14.2 Упругие и неупругие каналы. Фазы рассеяния . . . . .	93
14.3 Полное сечение неупругого взаимодействия . . . . .	96
14.4 Полное сечение взаимодействия. Оптическая теорема . .	97

# Лекция 1    Стационарная теория возмущений

## 1.1    Постановка задачи

Пусть система описывается гамильтонианом  $\hat{H}_0$ , а  $|k\rangle$  – это собственные векторы этого гамильтониана, или, иначе, решения стационарного уравнения Шредингера,

$$\hat{H}_0|k\rangle = E_k^0|k\rangle.$$

В ряде случаев (для ряда гамильтонианов  $\hat{H}_0$ ) это уравнение решается сравнительно просто. Однако чаще бывает трудно установить явный вид решений стационарного уравнения Шредингера.

Предположим, что система описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

таким, что собственные векторы  $|k\rangle$  и собственные значения  $E_k^0$  гамильтониана  $\hat{H}_0$  известны, а  $\hat{V}$  есть малая поправка к  $\hat{H}_0$  или, как говорят, возмущение. Тогда для поиска собственных векторов  $|\psi_n\rangle$  и собственных значений  $E_n$  гамильтониана  $\hat{H}$  можно воспользоваться стационарной теорией возмущений.

Оператор  $\hat{V}$  может, к примеру, описывать взаимодействие системы с известным спектром  $E_k^0$  с некоторой другой системой или с внешним полем. Если это взаимодействие является слабым, т.е. имеется малый параметр  $\varepsilon$  такой, что

$$\langle \hat{V} \rangle \sim \varepsilon \langle \hat{H}_0 \rangle, \quad \varepsilon \ll 1,$$

то следует ожидать, что энергетический спектр системы меняется незначительно.

Векторы состояний  $|\psi_n\rangle$  и энергии  $E_n$  возмущенной системы определяются стационарным уравнением Шредингера,

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle.$$

Поскольку ортонормированные векторы  $|k\rangle$  образуют полный базис в пространстве векторов состояний, то каждый из векторов  $|\psi_n\rangle$  может быть представлен в виде разложения

$$|\psi_n\rangle = \sum_k c_{nk}|k\rangle.$$

Задача сводится к определению коэффициентов  $c_{nk}$ .

## 1.2 Случай невырожденного спектра

В качестве первого шага мы рассмотрим случай, когда спектр гамильтониана  $\hat{H}_0$  невырожден.

Подставляя  $|\psi_n\rangle$  в виде выписанного разложения в стационарное уравнение Шредингера, получим:

$$\hat{H}_0 \sum_k c_{nk} |k\rangle + \hat{V} \sum_k c_{nk} |k\rangle = E_n \sum_k c_{nk} |k\rangle,$$

или

$$\sum_k c_{nk} E_k^0 |k\rangle + \sum_k c_{nk} \hat{V} |k\rangle = E_n \sum_k c_{nk} |k\rangle.$$

Проецируя полученное соотношение на  $\langle m|$ , находим:

$$\sum_k c_{nk} E_k^0 \langle m|k\rangle + \sum_k c_{nk} \langle m|\hat{V}|k\rangle = E_n \sum_k c_{nk} \langle m|k\rangle.$$

Условие ортонормировки для собственных векторов гамильтониана  $\hat{H}_0$  имеет вид

$$\langle m|k\rangle = \delta_{mk}.$$

Поэтому

$$c_{nm} E_m^0 + \sum_k c_{nk} V_{mk} = E_n c_{nm},$$

где  $V_{mk} \equiv \langle m|\hat{V}|k\rangle$ . Таким образом мы приходим к уравнениям для неизвестных величин  $E_n$  и  $c_{nk}$ :

$$(E_n - E_m^0) c_{nm} = \sum_k c_{nk} V_{mk}.$$

Идея теории возмущения заключается в том, что все неизвестные величины ищутся в виде разложений по малому параметру  $\varepsilon$ :

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots,$$

$$c_{nk} = c_{nk}^{(0)} + c_{nk}^{(1)} + c_{nk}^{(2)} + \dots,$$

где верхний индекс указывает на порядок малости, т.е., например,  $E_n^{(2)} \sim \varepsilon^2$ . Соответственно:

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n\rangle^{(0)} + |\psi_n\rangle^{(1)} + \dots,$$

где

$$|\psi_n\rangle^{(0)} = \sum_k c_{nk}^{(0)}|k\rangle, \quad |\psi_n\rangle^{(1)} = \sum_k c_{nk}^{(1)}|k\rangle, \quad \dots$$

Подставляя выписанные разложения в уравнения для  $E_n$  и  $c_{nk}$ , получим:

$$\begin{aligned} (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots - E_m^0)(c_{nm}^{(0)} + c_{nm}^{(1)} + c_{nm}^{(2)} + \dots) = \\ = \sum_k (c_{nk}^{(0)} + c_{nk}^{(1)} + c_{nk}^{(2)} + \dots)V_{mk}. \end{aligned}$$

Рассматривая последовательно все слагаемые 0-го, 1-го, 2-го и т.д. порядков малости, мы запишем бесконечную последовательность равенств:

$$\text{в 0-м порядке: } (E_n^{(0)} - E_m^0)c_{nm}^{(0)} = 0,$$

$$\text{в 1-м порядке: } (E_n^{(0)} - E_m^0)c_{nm}^{(1)} + E_n^{(1)}c_{nm}^{(0)} = \sum_k c_{nk}^{(0)}V_{mk},$$

$$\text{во 2-м порядке: } (E_n^{(0)} - E_m^0)c_{nm}^{(2)} + E_n^{(1)}c_{nm}^{(1)} + E_n^{(2)}c_{nm}^{(0)} = \sum_k c_{nk}^{(1)}V_{mk},$$

...

Легко видеть, что в нулевом порядке мы имеем

$$E_n^{(0)} = E_n^0, \quad c_{nm}^{(0)} = \delta_{nm},$$

т.е. собственные векторы  $|\psi_n\rangle^{(0)} = |n\rangle$  и собственные значения  $E_n^{(0)} = E_n^0$  гамильтониана  $\hat{H}$  совпадают с собственными векторами и собственными значениями гамильтониана  $\hat{H}_0$  (как, конечно, и должно быть).

В первом порядке имеем

$$(E_n^0 - E_m^0)c_{nm}^{(1)} + E_n^{(1)}\delta_{nm} = V_{mn}.$$

Пусть  $n = m$ , тогда

$$E_n^{(1)} = V_{nn}.$$

Пусть  $n \neq m$ , тогда

$$(E_n^0 - E_m^0)c_{nm}^{(1)} = V_{mn} \quad \Rightarrow \quad c_{nm}^{(1)} = \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}.$$

Коэффициенты  $c_{nm}^{(1)}$  остались неопределенными.



Выпишем вклады нулевого и первого порядков в вектор состояния  $|\psi_n\rangle$ :

$$|\psi_n\rangle \simeq |\psi_n\rangle^{(0)} + |\psi_n\rangle^{(1)} = |n\rangle + \sum_k c_{nk}^{(1)}|k\rangle = (1 + c_{nn}^{(1)})|n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)}|k\rangle.$$

Мы видим, что новые состояния составляются из старых путем смешивания. Условие нормировки для выписанного вектора состояния имеет вид:

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad |1 + c_{nn}^{(1)}|^2 + \sum_{k \neq n} |c_{nk}^{(1)}|^2 = 1.$$

Заметим, что второе слагаемое в левой части получившегося уравнения имеет второй порядок малости. Следовательно в рассматриваемом приближении его нужно отбросить. Для условия нормировки тогда получим:

$$|1 + c_{nn}^{(1)}|^2 = 1.$$

Это означает, что  $c_{nn}^{(1)} = i\alpha$  есть чисто мнимая величина, где  $\alpha \sim \varepsilon$ . Тогда с точностью до величин 1-го порядка малости вектор  $n$ -го состояния выглядит следующим образом:

$$|\psi_n\rangle = (1 + i\alpha)|n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)}|k\rangle \simeq e^{i\alpha}|n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)}|k\rangle.$$

Домножая  $|\psi_n\rangle$  на фазовый множитель  $e^{-i\alpha}$ , для переопределенного вектора  $n$ -го состояния с той же точностью находим:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)}|k\rangle.$$

Таким образом, всегда можно принять, что

$$c_{nn}^{(1)} = 0.$$

Мы показали, что в 1-м порядке теории возмущений смещение  $n$ -го энергетического уровня равно диагональному матричному элементу  $V_{nn}$ . Если же  $V_{nn} = 0$ , то изменение энергии  $n$ -го уровня определяется поправкой 2-го порядка. В этом приближении имеем:

$$(E_n^0 - E_m^0)c_{nm}^{(2)} + V_{nn}c_{nm}^{(1)} + E_n^{(2)}\delta_{nm} = \sum_k c_{nk}^{(1)}V_{mk}.$$

Полагая  $n = m$ , получим

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} V_{nk} = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^0 - E_k^0}.$$

Здесь учтено, что  $V_{kn} = V_{nk}^*$  вследствие эрмитовости оператора  $\hat{V}$ .

Итак, мы рассмотрели случай, когда система, описываемая гамильтонианом  $\hat{H}_0$ , обладает невырожденным энергетическим спектром. Полученные результаты верны, если

$$|V_{kn}| \ll |E_n^0 - E_k^0|.$$

### 1.3 Случай вырожденного спектра

Рассмотрим теперь случай, когда спектр оператора  $\hat{H}_0$ , вообще говоря, вырожден. В этом случае каждому энергетическому уровню могут соответствовать несколько векторов состояний. Пусть

$$\hat{H}_0|n\alpha\rangle = E_n^0|n\alpha\rangle, \quad \alpha = 1, 2, \dots, k_n,$$

где  $k_n$  есть кратность вырождения  $n$ -го энергетического уровня.

Задача на собственные векторы и собственные значения гамильтониана  $\hat{H}$  имеет вид:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi_{n\beta}\rangle = E_{n\beta}|\psi_{n\beta}\rangle.$$

Ищем новые собственные векторы в виде разложений по исходным векторам

$$|\psi_{n\beta}\rangle = \sum_{k\alpha} c_{n\beta, k\alpha} |k\alpha\rangle.$$

Действуя так же, как ранее, получим точные уравнения для неизвестных величин  $E_{n\beta}$  и  $c_{n\beta, k\alpha}$ :

$$(E_{n\beta} - E_m^0)c_{n\beta, m\gamma} = \sum_{k\alpha} c_{n\beta, k\alpha} V_{m\gamma, k\alpha}.$$

Ищем энергии  $E_{n\beta}$  и коэффициенты  $c_{n\beta, k\alpha}$  в виде разложений по малому параметру  $\varepsilon$ :

$$E_{n\beta} = E_{n\beta}^{(0)} + E_{n\beta}^{(1)} + \dots = E_n^0 + E_{n\beta}^{(1)} + \dots,$$

$$c_{n\beta, k\alpha} = c_{n\beta, k\alpha}^{(0)} + c_{n\beta, k\alpha}^{(1)} + \dots = c_{\beta\alpha} \delta_{nk} + c_{n\beta, k\alpha}^{(1)} + \dots$$

Здесь мы сразу выписали явный вид  $E_{n\beta}^{(0)}$  и  $c_{n\beta, k\alpha}^{(0)}$  понимая, что в нулевом приближении собственные векторы и собственные значения оператора  $\hat{H}$  совпадают с собственными векторами и собственными значениями оператора  $\hat{H}_0$ .

В случае  $n = m$  приравнивание величин первого порядка в точных уравнениях дает:

$$E_{n\beta}^{(1)} c_{\beta\gamma} = \sum_{\alpha} c_{\beta\alpha} V_{n\gamma, n\alpha}$$

или

$$\sum_{\alpha} (V_{n\gamma, n\alpha} - E_{n\beta}^{(1)} \delta_{\gamma\alpha}) c_{\beta\alpha} = 0.$$

Фиксируя  $\beta$ , получаем систему из  $k_n$  уравнений ( $\gamma = 1, 2, \dots, k_n$ ) с  $k_n$  неизвестными  $c_{\beta\alpha}$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, k_n$ ).

Условие разрешимости выписанной системы,

$$\det \|V_{n\gamma, n\alpha} - E_{n\beta}^{(1)} \delta_{\gamma\alpha}\| = 0,$$

является алгебраическим уравнением  $k_n$ -го порядка на  $E_{n\beta}^{(1)}$ . Это уравнение называется секулярным. В общем случае такое уравнение имеет  $k_n$  решений  $E_{n\beta}^{(1)}$  ( $\beta = 1, 2, \dots, k_n$ ).

Таким образом, секулярное уравнение определяет характер расщепления  $n$ -го уровня невозмущенной системы на  $k_n$  подуровней под действием возмущения  $\hat{V}$ . Состояние с энергией

$$E_{n\beta} \simeq E_n^0 + E_{n\beta}^{(1)}$$

в нулевом приближении описывается вектором

$$|\psi_{n\beta}\rangle \simeq \sum_{\alpha} c_{\beta\alpha} |n\alpha\rangle.$$

## Лекция 2    Нестационарная теория возмущений

### 2.1    Постановка задачи

Пусть возмущение  $\hat{V}(t)$  зависит от времени. Будем считать, что возмущение начинает действовать в момент  $t = 0$ , т.е.  $\hat{V}(t) \equiv 0$  при  $t < 0$ .

### 2.2    Внезапное возмущение

Внезапным возмущением называется случай, когда  $\hat{V}(t)$  меняется от нуля до фиксированного значения  $\hat{V}$  за время  $\tau$ , малое по сравнению

с характерным временем изменения системы  $T$ . Для оценки времени  $T$  возьмем уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi.$$

За малое время  $\Delta t$  масштаб изменения волновой функции  $|\Delta \Psi|$  определяется соотношением:

$$\hbar \frac{|\Delta \Psi|}{\Delta t} \sim |E_i - E_j| |\Psi|,$$

где  $|E_i - E_j|$  – разность характерных энергий системы. Ясно, что относительное изменение волновой функции мало,

$$\frac{|\Delta \Psi|}{|\Psi|} \sim \frac{\Delta t |E_i - E_j|}{\hbar} \ll 1,$$

если время  $\Delta t$  незначительно по сравнению с характерным временем изменения системы. Отсюда получаем порядковую оценку времени  $T$ :

$$\Delta t \ll \frac{\hbar}{|E_i - E_j|} \sim T.$$

Пусть при  $t = 0$  система находится в стационарном состоянии  $|i\rangle$ , т.е.

$$|\Psi(0)\rangle = |i\rangle.$$

За время  $\tau \ll T$  волновая функция не успевает заметно измениться, поэтому:

$$|\Psi(\tau)\rangle \simeq |\Psi(0)\rangle = |i\rangle.$$

С другой стороны, при  $t > \tau$  система описывается гамильтонианом

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

а ее стационарные состояния определяются собственными векторами  $|\psi'_k\rangle$  этого гамильтониана. Разложим  $|\Psi(\tau)\rangle$  по полному ортонормированному базису  $|\psi'_k\rangle$ :

$$|\Psi(\tau)\rangle = \sum_k a_k |\psi'_k\rangle.$$

Коэффициент разложения

$$a_k = \langle \psi'_k | \Psi(\tau) \rangle \simeq \langle \psi'_k | i \rangle$$

есть не что иное, как амплитуда вероятности перехода из  $i$ -го стационарного состояния исходной системы в  $k$ -ое стационарное состояние измененной системы.

## 2.3 Обобщение на случай произвольного $\tau$

Если время  $\tau$  не мало, то для определения вектора состояния  $|\Psi(t)\rangle$  нужно решать уравнение Шредингера,

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t))|\Psi(t)\rangle,$$

с начальным условием:

$$|\Psi(0)\rangle = |i\rangle.$$

Ищем  $|\Psi(t)\rangle$  в виде разложения

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k a_k(t) |k\rangle e^{-i \frac{E_k^0 t}{\hbar}}$$

по стационарным состояниям системы, описывающейся гамильтонианом  $\hat{H}_0$ . При этом в силу начального условия:

$$a_k(0) = \delta_{ik}.$$

Подстановка выписанного разложения в уравнение Шредингера дает:

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_k \dot{a}_k(t) |k\rangle e^{-i \frac{E_k^0 t}{\hbar}} + \sum_k a_k(t) |k\rangle E_k^0 e^{-i \frac{E_k^0 t}{\hbar}} &= \\ = \sum_k a_k(t) \hat{H}_0 |k\rangle e^{-i \frac{E_k^0 t}{\hbar}} + \sum_k a_k(t) \hat{V}(t) |k\rangle e^{-i \frac{E_k^0 t}{\hbar}}. \end{aligned}$$

Поскольку  $\hat{H}_0 |k\rangle = E_k^0 |k\rangle$ , то после сокращений получим

$$i\hbar \sum_k \dot{a}_k(t) |k\rangle e^{-i \frac{E_k^0 t}{\hbar}} = \sum_k a_k(t) \hat{V}(t) |k\rangle e^{-i \frac{E_k^0 t}{\hbar}}.$$

Проецируя это соотношение на  $\langle n|$ , находим:

$$i\hbar \dot{a}_n(t) e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}} = \sum_k a_k(t) V_{nk}(t) e^{-i \frac{E_k^0 t}{\hbar}},$$

где  $V_{nk}(t) = \langle n | \hat{V}(t) | k \rangle$ , или

$$\dot{a}_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k a_k(t) V_{nk}(t) e^{-i \frac{(E_k^0 - E_n^0)t}{\hbar}}.$$

Мы получили систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка для неизвестных амплитуд  $a_n(t)$ ,  $n = 1, 2, \dots$ . Если возмущение мало,

$$\langle \hat{V}(t) \rangle \sim \varepsilon \langle \hat{H}_0 \rangle, \quad \varepsilon \ll 1,$$

то система может быть решена методом последовательных приближений.

Представим каждую неизвестную амплитуду в виде ряда по малому параметру  $\varepsilon$ :

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + a_n^{(1)}(t) + a_n^{(2)}(t) + \dots,$$

где верхний индекс указывает на порядок малости, т.е., например,  $a_n^{(2)} \sim \varepsilon^2$ . В частности, для начальных условий имеем

$$a_n(0) = a_n^{(0)}(0) + a_n^{(1)}(0) + a_n^{(2)}(0) + \dots = \delta_{ni}.$$

Следовательно

$$a_n^{(0)}(0) = \delta_{ni}, \quad a_n^{(1)}(0) = 0, \quad a_n^{(2)}(0) = 0, \quad \dots$$

Подставим выписанные разложения в систему дифференциальных уравнений:

$$\dot{a}_n^{(0)}(t) + \dot{a}_n^{(1)}(t) + \dots = -\frac{i}{\hbar} \sum_k (a_k^{(0)}(t) + a_k^{(1)}(t) + \dots) V_{nk}(t) e^{-i \frac{(E_k^0 - E_n^0)t}{\hbar}}.$$

Приравнивая величины одного порядка малости друг другу, в нулевом порядке находим:

$$\dot{a}_n^{(0)}(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad a_n^{(0)}(t) = \text{const.}$$

Следовательно

$$a_n^{(0)}(t) = a_n^{(0)}(0) = \delta_{ni}.$$

Далее, в первом порядке имеем

$$\dot{a}_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k a_k^{(0)}(t) V_{nk}(t) e^{-i \frac{(E_k^0 - E_n^0)t}{\hbar}}.$$

Но  $a_k^{(0)}(t) = \delta_{ki}$ , поэтому

$$\begin{cases} \dot{a}_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{ni}(t) e^{-i \frac{(E_i^0 - E_n^0)t}{\hbar}}, \\ a_n^{(1)}(0) = 0. \end{cases}$$

Решение записывается в виде интеграла

$$a_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{ni}(t') e^{-i \frac{(E_i^0 - E_n^0)t'}{\hbar}} dt'.$$

## 2.4 Возмущение, действующее в течение конечного времени

Рассмотрим случай, когда возмущение  $\hat{V}(t)$  действует в течение конечного времени или быстро затухает при  $t \rightarrow +\infty$ . В этом случае

$$a_n^{(1)}(+\infty) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{+\infty} V_{ni}(t) e^{-i \frac{(E_i^0 - E_n^0)t}{\hbar}} dt.$$

Таким образом, вероятность перехода из  $i$ -го состояния в  $n$ -е состояние в 1-м порядке нестационарной теории возмущений равна

$$w(i \rightarrow n) = |a_n^{(1)}(+\infty)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^{+\infty} V_{ni}(t) e^{-i \frac{(E_i^0 - E_n^0)t}{\hbar}} dt \right|^2.$$

Пусть возмущение  $\hat{V}(t)$  плавно меняется за время действия  $\tau$ , значительно превосходящее характерное время изменения системы  $T$ , т.е.

$$\tau \gg \frac{\hbar}{|E_i^0 - E_n^0|} \sim T.$$

Легко видеть, что в этом случае вероятность перехода  $w(i \rightarrow n)$  мала. Такое медленно меняющееся возмущение называют адиабатическим.

## 2.5 Периодическое возмущение

Рассмотрим важный класс возмущений, описывающихся гармоническими функциями времени. Таково, к примеру, возмущение, связанное со взаимодействием атома с полем плоской электромагнитной волны (фотоэффект). В силу эрмитовости гамильтониана оператор возмущения в общем случае может быть представлен в форме

$$\hat{V}(t) = \hat{V}^- e^{-i\omega t} + \hat{V}^+ e^{i\omega t}.$$

В 1-м порядке нестационарной теории возмущений амплитуда перехода из  $i$ -го состояния в  $n$ -е состояние имеет вид

$$a_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t e^{-i \frac{(E_i^0 - E_n^0 + \hbar\omega)t'}{\hbar}} dt' - \frac{i}{\hbar} V_{in}^* \int_0^t e^{-i \frac{(E_i^0 - E_n^0 - \hbar\omega)t'}{\hbar}} dt',$$

где  $V_{ni} = \langle n | \hat{V} | i \rangle$  и  $V_{in}^* = \langle n | \hat{V}^+ | i \rangle$ . Вычисляя интегралы и принимая во внимание начальные условия, находим

$$a_n^{(1)}(t) = V_{ni} \frac{e^{-i \frac{(E_i^0 - E_n^0 + \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_i^0 - E_n^0 + \hbar\omega} + V_{in}^* \frac{e^{-i \frac{(E_i^0 - E_n^0 - \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_i^0 - E_n^0 - \hbar\omega}.$$

Обратимся для наглядности к фотоэффекту. До взаимодействия с переменным электромагнитным полем электрон находится в стационарном состоянии  $|i\rangle$  с энергией  $E_i^0$ . После поглощения фотона с энергией  $\hbar\omega$  электрон переходит в одно из состояний непрерывного спектра с энергией

$$E_f = E_i^0 + \hbar\omega.$$

Легко видеть, что амплитуда  $a_n^{(1)}(t)$  перехода в состояние с энергией  $E_n^0$  действительно резко возрастает, если

$$E_n^0 \simeq E_i^0 + \hbar\omega.$$

В этом случае первое слагаемое в формуле для  $a_n^{(1)}(t)$  линейно растет со временем,

$$\sim V_{ni} \frac{t}{\hbar},$$

тогда как второе слагаемое имеет масштаб

$$\sim \frac{V_{in}^*}{|E_i^0 - E_n^0|}.$$

Если время действия возмущения  $t$  велико по сравнению с характерным временем изменения системы  $T$ , т.е.

$$t \gg \frac{\hbar}{|E_i^0 - E_n^0|} \sim T,$$

то вторым слагаемым в формуле для  $a_n^{(1)}(t)$  можно пренебречь, так что

$$a_n^{(1)}(t) = -2i V_{ni} e^{-i \frac{(E_i^0 - E_n^0 + \hbar\omega)t}{2\hbar}} \left( \frac{\sin \frac{(E_i^0 - E_n^0 + \hbar\omega)t}{2\hbar}}{E_i^0 - E_n^0 + \hbar\omega} \right).$$



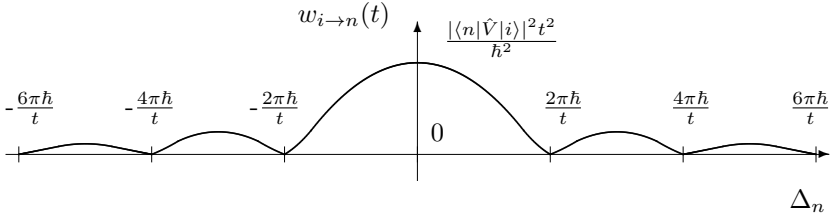
Введем обозначения:

$$E_f = E_i^0 + \hbar\omega, \quad \Delta_n = E_n^0 - E_f.$$

Тогда для вероятности перехода из  $i$ -го состояния в  $n$ -е состояние получим:

$$w_{i \rightarrow n}(t) = |a_n^{(1)}(t)|^2 = 4|\langle n|\hat{V}|i\rangle|^2 \frac{\sin^2(\Delta_n t/2\hbar)}{\Delta_n^2}.$$

Зависимость  $w_{i \rightarrow n}(t)$  от конечной энергии  $\Delta_n$  (отсчитанной от  $E_f$ ) представлена на рисунке.



Мы видим, что к моменту времени  $t$  характерное отличие конечной энергии  $E_n^0$  от энергии  $E_f$  определяется формулой

$$\frac{2\pi\hbar}{t} \simeq \Delta_n.$$

В общем случае вводят соотношение

$$\Delta t \Delta E \simeq 2\pi\hbar,$$

связывающее время действия возмущения  $\Delta t$  и характерную неопределенность энергии системы  $\Delta E$ . Этот результат иногда называют соотношением неопределенности для времени и энергии.

Предположим, что имеется плотное множество конечных состояний, т.е. на интервал энергий от  $E_n^0$  до  $E_n^0 + \Delta E_n^0$  приходится  $\rho(E_n^0)\Delta E_n^0$  состояний. Функция  $\rho(E)$  называется плотностью конечных состояний. Тогда полная вероятность перехода из начального  $i$ -го состояния в одно из конечных состояний определяется интегралом

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \int w_{i \rightarrow n}(t) \rho(E_n^0) dE_n^0.$$

Поскольку матричный элемент  $\langle n|\hat{V}|i\rangle$  и плотность конечных состояний  $\rho(E_n^0)$  являются медленными функциями энергии  $E_n^0$ , то

$$P_{i \rightarrow f}(t) = 4|\langle f|\hat{V}|i\rangle|^2 \rho(E_f) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(\Delta_n t/2\hbar)}{\Delta_n^2} d\Delta_n.$$

Вводя безразмерную переменную интегрирования

$$x = \frac{\Delta_n t}{2\hbar},$$

легко находим:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2t}{\hbar} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \rho(E_f) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \frac{2\pi t}{\hbar} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \rho(E_f).$$

Вероятность перехода прямо пропорциональна времени действия возмущения. Этот результат, однако, получен в рамках теории возмущений, т.е. справедлив лишь до тех пор, пока

$$P_{i \rightarrow f}(t) \ll 1.$$

Соответственно удобно ввести вероятность перехода в единицу времени

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{P_{i \rightarrow f}(t)}{t}.$$

В 1-м порядке нестационарной теории возмущений для этой вероятности получено:

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \rho(E_f).$$

Это соотношение называется правилом Ферми.

Заметим, что правило Ферми для вероятности перехода в единицу времени справедливо и в случае, когда в момент времени  $t = 0$  на систему накладывается постоянное (не зависящее от времени) возмущение  $\hat{V}$  ( $\hat{V}^+ = \hat{V}$  в силу эрмитовости гамильтониана). В этом случае  $\omega = 0$ , так что  $E_f = E_i^0$ .

Пусть  $W(t)$  – это вероятность того, что система к произвольному (не обязательно малому) моменту времени  $t$  продолжает находиться в начальном  $i$ -м состоянии. Понятно, что  $W(0) = 1$ . Для малого промежутка времени  $\Delta t$  имеем

$$W(t + \Delta t) = W(t)(1 - w_{i \rightarrow f} \Delta t).$$

В пределе  $\Delta t \rightarrow 0$  получим дифференциальное уравнение

$$\frac{dW}{dt} = -w_{i \rightarrow f} W(t).$$

Его решение имеет следующий вид (закон радиоактивного распада):

$$W(t) = e^{-w_{i \rightarrow f} t} = e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad \tau = \frac{1}{w_{i \rightarrow f}}.$$

Величина  $\tau$  называется временем жизни начального состояния.

# Лекция 3 Релятивистские квантовые уравнения

## 3.1 Нерелятивистское уравнение Шредингера

В нерелятивистской квантовой механике волновая функция частицы, движущейся в потенциале  $U(\mathbf{r})$ , определяется уравнением Шредингера,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) \Psi.$$

Формально это уравнение может быть получено из нерелятивистской формулы для полной энергии частицы,

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}),$$

если ввести соответствие

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla.$$

## 3.2 Уравнение Клейна–Гордона

Предположим, что в релятивистском случае имеется точно такое же соответствие между классическими величинами и дифференциальными операторами. В отсутствие внешнего поля соотношение между энергией и импульсом имеет вид

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4.$$

Выполняя соответствующие подстановки, получим уравнение Клейна–Гордона,

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \Psi.$$

Уравнение Клейна–Гордона обладает рядом особенностей, которые выводят его за рамки привычных представлений о квантовой механике. Во-первых, уравнение Клейна–Гордона содержит вторую производную волновой функции по времени. Это означает, что состояние системы определяется не только волновой функцией начального состояния, но и ее первой производной по времени. Возникает расхождение с постулатом I квантовой механики в том его широком толковании, которое было использовано при введении уравнения Шредингера. Во-вторых, уравнение Клейна–Гордона, так же как уравнение Шредингера, приводит к уравнению непрерывности для некоторой плотности  $\rho$  и

некоторого тока  $\mathbf{j}$ . Покажем, что  $\rho$  не является положительно определенной величиной, т.е. не может быть интерпретирована как плотность вероятности.

Именно, домножая уравнение Клейна–Гордона

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \Delta \Psi + m^2 c^4 \Psi$$

на  $\Psi^*$ , а комплексное сопряженное уравнение Клейна–Гордона

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \Delta \Psi^* + m^2 c^4 \Psi^*$$

на  $\Psi$ , и вычитая второе из первого, найдем:

$$-\hbar^2 \left( \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} \right) = -\hbar^2 c^2 (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*).$$

Приведем левую и правую части к следующему виду:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*).$$

От этого соотношения нетрудно перейти к искомому уравнению непрерывности,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0.$$

В нерелятивистской квантовой механике плотность тока вероятности определяется формулой

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*).$$

Таким образом, переписывая полученное уравнение в следующем виде,

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) + \frac{2mi}{\hbar} \operatorname{div} \mathbf{j} = 0,$$

мы, фактически, приходим к уравнению непрерывности. Величина  $\rho$  определяется формулой

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right).$$

Легко видеть, что эта величина не является положительно определенной.

### 3.3 Уравнение Дирака

Дирак предложил другое уравнение для волновой функции релятивистской частицы. Он руководствовался следующими соображениями:

- 1) уравнение должно быть первого порядка по времени;
- 2) время (точнее, переменная  $x^0 = ct$ ) и координаты ( $x^1 = x$ ,  $x^2 = y$ ,  $x^3 = z$ ) должны входить в уравнение симметричным образом.

Тогда уравнение для свободной частицы массой  $m$  в самой общей форме имеет вид

$$\frac{\partial \Psi}{\partial (ct)} + A \frac{\partial \Psi}{\partial x} + B \frac{\partial \Psi}{\partial y} + C \frac{\partial \Psi}{\partial z} + D \frac{mc}{\hbar} \Psi = 0.$$

В последнее слагаемое введены фундаментальные постоянные  $c$  и  $\hbar$  так, что величина  $mc/\hbar$  имеет размерность обратной длины ( $\hbar/mc$  — это комптоновская длина волны для частицы массой  $m$ ).

Приводя полученное уравнение к виду

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar c \left( \alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) + \beta mc^2 \Psi,$$

мы обнаруживаем аналогию с нерелятивистским уравнением Шредингера,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi.$$

В качестве гамильтониана в данном случае выступает оператор

$$\hat{H} = -i\hbar c \left( \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \right) + \beta mc^2$$

или

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla.$$

Для определения неизвестных коэффициентов  $\alpha_i$  и  $\beta$  подействуем на полученное уравнение оператором  $i\hbar(\partial/\partial t)$ . Тогда

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{H} \Psi) = \hat{H} \left( i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) = \hat{H}^2 \Psi,$$

то есть

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \hat{H}^2 \Psi.$$

Естественно предположить, что это уравнение второго порядка является уравнением Клейна–Гордона. Следовательно

$$\hat{H}^2 = -\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4.$$

Подставляя в это условие выражение для оператора  $\hat{H}$ ,

$$(\alpha_i \hat{p}_i + \beta m c^2)(\alpha_i \hat{p}_i + \beta m c^2) = -\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4,$$

мы, в частности, находим, что слагаемое в левой части, линейное по  $\hat{p}_i$ , т.е. пропорциональное  $(\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \hat{p}_i$ , должно обращаться в нуль. Таким образом,

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_i \beta = -\beta \alpha_i.$$

Это означает, что  $\alpha_i$  и  $\beta$  не могут быть действительными или комплексными числами. Но они могут быть, например, матрицами.

### 3.4 Матрицы Дирака

Для определения вида этих матриц вернемся к оператору  $\hat{H}^2$ :

$$\begin{aligned} (-i\hbar c \alpha_i \nabla_i + \beta m c^2)(-i\hbar c \alpha_j \nabla_j + \beta m c^2) = \\ = -\hbar^2 c^2 \alpha_i \alpha_j \nabla_i \nabla_j - i\hbar m c^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \nabla_i + m^2 c^4 \beta^2. \end{aligned}$$

Первое слагаемое в правой части удобно переписать в симметризованной форме

$$\alpha_i \alpha_j \nabla_i \nabla_j \equiv \frac{\alpha_i \alpha_j \nabla_i \nabla_j + \alpha_j \alpha_i \nabla_j \nabla_i}{2} = \frac{\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i}{2} \nabla_i \nabla_j.$$

Таким образом, требуемое равенство

$$\hat{H}^2 = -\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4$$

имеет место, если матрицы–коэффициенты удовлетворяют следующим условиям:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i}{2} = \delta_{ij}, \\ \beta^2 = 1, \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0. \end{array} \right.$$

Воспользуемся, далее, тем, что оператор Гамильтона

$$\hat{H} = c \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta m c^2$$

является эрмитовым. Это означает, что матрицы  $\alpha_i$  и  $\beta$  также должны быть эрмитовыми,

$$\alpha_i^+ = \alpha_i, \quad \beta^+ = \beta.$$

Напомним, что любая эрмитова матрица всегда может быть диагонализирована с помощью подходящей унитарной матрицы. Т.е., например, для матрицы  $\alpha_i$ , всегда может быть подобрана такая унитарная матрица  $U$  ( $U^+U = 1$ ), что  $\alpha'_i = U\alpha_iU^+$  есть диагональная матрица.

Теперь заметим, что в соответствии с первыми двумя условиями системы,

$$\begin{cases} \alpha_i^2 = 1, \\ \beta^2 = 1, \end{cases}$$

собственными значениями матриц  $\alpha_i$  и  $\beta$  являются числа  $\pm 1$ . Это означает, что диагонализированные (с помощью подходящих унитарных матриц) матрицы  $\alpha'_i$  и  $\beta'$ , могут иметь на главной диагонали только числа  $\pm 1$ .

Покажем, наконец, что след искомым матриц равен нулю. Напомним, что след матрицы  $A$ ,

$$\text{Sp } A = \sum_i A_{ii},$$

это сумма ее диагональных элементов. Если след вычисляется от произведения матриц, то матрицы под знаком следа можно переставлять, а именно,

$$\text{Sp}(AB) = \sum_i \left( \sum_j A_{ij}B_{ji} \right) = \sum_j \left( \sum_i B_{ji}A_{ij} \right) = \text{Sp}(BA).$$

Итак, домножая

$$\alpha_i\beta = -\beta\alpha_i$$

слева на матрицу  $\beta$ , получим

$$\beta\alpha_i\beta = -\alpha_i.$$

Следовательно

$$\text{Sp}(\alpha_i) = -\text{Sp}(\beta\alpha_i\beta) = -\text{Sp}(\alpha_i\beta\beta) = -\text{Sp}(\alpha_i) \Rightarrow \text{Sp}(\alpha_i) = 0.$$

Аналогичным образом, домножая

$$\alpha_i\beta = -\beta\alpha_i$$

слева на матрицу  $\alpha_i$ , находим

$$\beta = -\alpha_i\beta\alpha_i,$$

откуда

$$\text{Sp}(\beta) = -\text{Sp}(\alpha_i \beta \alpha_i) = -\text{Sp}(\alpha_i \alpha_i \beta) = -\text{Sp}(\beta) \Rightarrow \text{Sp}(\beta) = 0.$$

Заметим, что след матрицы нечувствителен к унитарному преобразованию, то есть, например,

$$\text{Sp}(\alpha'_i) = \text{Sp}(U \alpha_i U^+) = \text{Sp}(\alpha_i U^+ U) = \text{Sp}(\alpha_i) = 0.$$

Таким образом, принимая во внимание, что на главной диагонали матриц  $\alpha'_i$  и  $\beta'$  стоят только числа  $\pm 1$ , мы приходим к выводу: матрицы  $\alpha_i$  и  $\beta$  могут иметь только четную размерность.

Простейшими матрицами четной размерности являются матрицы  $2 \times 2$ . Такими матрицами являются, например, матрицы Паули,

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Матрицы Паули эрмитовы ( $\sigma_i^+ = \sigma_i$ ) и удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\sigma_i^2 = 1, \quad \sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i \quad (i \neq j).$$

Однако матриц Паули всего три. В то же время для построения релятивистского уравнения необходимы четыре матрицы  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  и  $\beta$ .

Берем матрицы  $4 \times 4$ . Искомые матрицы в блочной форме (т.е. выраженные через матрицы-блоки размерности  $2 \times 2$ ) имеют следующий вид (стандартное представление):

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

где  $I$  – единичная матрица.

### 3.5 Плотность тока вероятности в теории Дирака

Итак, уравнение Дирака для свободной частицы,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (c\alpha \hat{p} + \beta mc^2) \Psi \equiv \hat{H} \Psi,$$

это матричное уравнение, решением которого является столбец

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}$$



из четырех функций  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3$  и  $\Psi_4$ , называемый биспинором. Заметим, что эрмитово сопряженный биспинор – это строка

$$\Psi^+ = (\Psi_1^* \Psi_2^* \Psi_3^* \Psi_4^*).$$

Уравнение Дирака по построению является дифференциальным уравнением первого порядка по времени в согласии с постулатом I квантовой механики. Выясним теперь, к какому уравнению непрерывности приводит уравнение Дирака. Для этого, как и раньше, домножим уравнение для  $\Psi$ ,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \nabla \Psi + mc^2 \beta \Psi,$$

на  $\Psi^+$  слева. В то же время уравнение для  $\Psi^+$ ,

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} = i\hbar c (\nabla \Psi^+) \boldsymbol{\alpha} + mc^2 \Psi^+ \beta,$$

домножим на  $\Psi$  справа. Затем, вычитая из первого второе, находим:

$$i\hbar \left( \Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} \Psi \right) = -i\hbar c (\Psi^+ \boldsymbol{\alpha} (\nabla \Psi) + (\nabla \Psi^+) \boldsymbol{\alpha} \Psi).$$

Или

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0,$$

где

$$\rho = \Psi^+ \Psi = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + |\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2 > 0$$

есть положительно определенная плотность вероятности, а

$$\mathbf{j} = c \Psi^+ \boldsymbol{\alpha} \Psi$$

есть плотность тока вероятности.

Условие нормировки имеет вид

$$\int_{\mathbb{R}_3} \Psi^+ \Psi d^3 r = 1.$$

# Лекция 4 Уравнения Дирака и Паули

## 4.1 Решение уравнения Дирака для свободной частицы

Уравнение Дирака для свободной релятивистской частицы,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad \hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2,$$

имеет тот же вид, что и уравнение Шредингера. Поэтому так же, как в нерелятивистском случае, стационарное состояние с энергией  $E$  описывается волновой функцией

$$\Psi_E(\mathbf{r}, t) = \psi_E(\mathbf{r}) e^{-i \frac{Et}{\hbar}},$$

где  $\psi_E(\mathbf{r})$  есть собственная функция оператора  $\hat{H}$ ,

$$\hat{H} \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}).$$

Построим решение уравнения Дирака для свободной частицы с энергией  $E$ , т.е. решим стационарное уравнение

$$(c\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2) \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}).$$

Поскольку операторы  $\hat{H}$  и  $\hat{\mathbf{p}}$  коммутируют,

$$[c\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2, \hat{\mathbf{p}}] = 0,$$

то в качестве  $\psi_E(\mathbf{r})$  можно взять собственную функцию оператора импульса, а именно,

$$\psi_E(\mathbf{r}) = u e^{i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}},$$

где

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \phi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix},$$

есть биспинор, компонентами которого являются постоянные величины.

Подставляя предложенное решение в стационарное уравнение,

$$(c\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2) u e^{i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} = E u e^{i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}},$$

получим систему алгебраических уравнений для четырех компонент биспинора  $u$ ,

$$(c\alpha\mathbf{p} + \beta mc^2)u = Eu$$

или

$$c\mathbf{p} \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

Для 2-компонентных постоянных спиноров  $\phi$  и  $\chi$  возникает система из двух уравнений,

$$\begin{cases} c\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}\chi + mc^2\phi = E\phi, \\ c\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}\phi - mc^2\chi = E\chi. \end{cases}$$

Приведение подобных слагаемых дает

$$\begin{cases} (mc^2 - E)\phi + c\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}\chi = 0, \\ -c\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}\phi + (mc^2 + E)\chi = 0. \end{cases}$$

Условие разрешимости этой системы имеет вид

$$\det \begin{vmatrix} mc^2 - E & c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} \\ -c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} & mc^2 + E \end{vmatrix} = 0$$

или

$$(m^2c^4 - E^2) + c^2(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) = 0.$$

Выполним преобразование (пользуясь свойствами матриц Паули):

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) = \sigma_i\sigma_j p_i p_j = (\delta_{ij} + ie_{ijk}\sigma_k)p_i p_j = \mathbf{p}^2 + i\sigma_k e_{ijk} p_i p_j.$$

В силу того, что тензор  $p_i p_j$  симметричен, а тензор  $e_{ijk}$  антисимметричен по индексам  $i$  и  $j$ , их свертка обращается в нуль. Поэтому условие разрешимости принимает вид

$$m^2c^4 - E^2 + \mathbf{p}^2c^2 = 0.$$

Таким образом, для энергии  $E$  свободной частицы с импульсом  $\mathbf{p}$  находим

$$E = \pm\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}.$$

Пусть

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} > 0,$$

тогда

$$\chi = \frac{1}{mc^2 + E} \mathbf{c} \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \phi,$$

так что

$$|\chi| \ll |\phi|, \quad \text{если } cp \ll E \simeq mc^2 \quad \text{или} \quad v \ll c.$$

Следовательно в нерелятивистском случае мы, фактически, имеем дело с 2-компонентным спинором, а не с биспинором,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \begin{pmatrix} \phi \\ 0 \end{pmatrix} e^{i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r} - Et}{\hbar}}.$$

В нерелятивистской квантовой механике 2-компонентные спиноры используются для описания частиц со спином 1/2. Таким образом, мы приходим к выводу, что уравнение Дирака есть релятивистское уравнение для частицы со спином 1/2.

Заметим, что если взять отрицательное значение энергии

$$E = -\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} < 0,$$

то

$$\phi = -\frac{1}{mc^2 + |E|} \mathbf{c} \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \chi.$$

При этом

$$|\phi| \ll |\chi|, \quad \text{если } cp \ll |E| \simeq mc^2,$$

т.е.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} e^{i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r} - Et}{\hbar}}.$$

Таким образом, нижние компоненты биспинора необходимы для описания свободно движущихся частиц с отрицательными энергиями.

Существование решений с отрицательными энергиями позволило Дираку выдвинуть гипотезу о существовании античастиц. Это предсказание теории было подтверждено экспериментами (для всех частиц со спином 1/2 обнаружены античастицы). Суть этой идеи состоит в том, что вакуум – это такое состояние, что все уровни с отрицательными энергиями заняты частицами, а все уровни с положительными энергиями – свободны. Тогда переход частицы из состояния с отрицательной энергией  $E_1 < 0$  в состояние с положительной энергией  $E_2 > 0$  интерпретируется как рождение пары – частицы с энергией  $E_2$  и античастицы с энергией  $|E_1|$ . Обратный переход из состояния с положительной энергией  $E_2 > 0$  в состояние с отрицательной энергией  $E_1 < 0$ , в котором выделяется энергия  $|E_1| + E_2$ , интерпретируется как аннигиляция (взаимное уничтожение) частицы и античастицы.

## 4.2 Уравнение Дирака для частицы во внешнем поле

Рассмотрим релятивистскую частицу с зарядом  $e$  в электромагнитном поле. Функция Лагранжа этой частицы имеет вид

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - e\Phi + \frac{e}{c} \mathbf{A} \mathbf{v},$$

где  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  и  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  – скалярный и векторный потенциалы электромагнитного поля. Обобщенный импульс частицы определяется формулой

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad \mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

тогда как для обобщенной (полной) энергии получим

$$\varepsilon = \mathbf{v} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} - L = E + e\Phi, \quad E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

Релятивистская связь между энергией и импульсом свободной частицы,

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4,$$

переходит в связь между обобщенной энергией и обобщенным импульсом релятивистской частицы во внешнем поле,

$$(\varepsilon - e\Phi)^2 = \left( \mathbf{P} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4.$$

Соответственно естественно предположить, что при наличии электромагнитного поля уравнение Клейна–Гордона принимает вид

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right)^2 \Psi = c^2 \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi + m^2 c^4 \Psi.$$

Уравнение Дирака для свободной частицы было получено в результате линеаризации уравнения Клейна–Гордона. Предполагая, что та же линеаризация справедлива и при наличии электромагнитного поля, находим

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \Psi = c\alpha \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi + \beta mc^2 \Psi$$

или

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = c\alpha \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi + \beta mc^2 \Psi + e\Phi \Psi.$$

Таким образом, уравнение для волновой функции релятивистской частицы со спином  $1/2$  во внешнем электромагнитном поле выглядит точно так же, как уравнение Шредингера,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi,$$

но гамильтониан в данном случае имеет вид

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \beta mc^2 + e\Phi.$$

### 4.3 Уравнение Паули

Рассмотрим нерелятивистский предел, когда энергия  $E$  положительна и мало отличается от энергии покоя частицы  $mc^2$ . Представим волновую функцию в форме:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{r}, t) \\ \chi(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}.$$

Подстановка в уравнение Дирака дает

$$\begin{aligned} mc^2 e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + i\hbar e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \\ = c\boldsymbol{\alpha} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + \beta mc^2 e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + e\Phi e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Сократим, далее, общий множитель  $e^{-imc^2 t/\hbar}$  и перепишем полученное уравнение, пользуясь явными выражениями для матриц  $\boldsymbol{\alpha}$  и  $\beta$ ,

$$\begin{aligned} mc^2 \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \\ = c \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + e\Phi \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Получим систему

$$\begin{cases} mc^2 \phi + i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = c\boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi + mc^2 \phi + e\Phi \phi, \\ mc^2 \chi + i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \phi - mc^2 \chi + e\Phi \chi \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = c\boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi + e\Phi\phi, \\ 2mc^2\chi + i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \phi + e\Phi\chi. \end{cases}$$

Обратимся ко второму уравнению в этой системе. В нерелятивистском случае

$$|e\Phi| \ll mc^2, \quad \left| i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} \right| \ll mc^2|\chi|.$$

Поэтому с точностью до членов первого порядка по малому параметру  $v/c$  находим

$$\chi \simeq \frac{\boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)}{2mc} \phi, \quad |\chi| \ll |\phi|.$$

Иными словами, в нерелятивистском приближении биспинор

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{r}, t) \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}}$$

полностью определяется спинором  $\phi(\mathbf{r}, t)$ .

Подставляя в первое уравнение системы приближенное выражение для  $\chi$ , мы получим уравнение для спинора  $\phi$ , справедливое с точностью до членов первого порядка по  $v/c$ , а именно,

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = c\boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \frac{\boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)}{2mc} \phi + e\Phi\phi.$$

Выполним преобразование:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) &= \sigma_i \sigma_j \left( \hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left( \hat{p}_j - \frac{e}{c} A_j \right) = \\ &= (\delta_{ij} + i\sigma_k e_{ijk}) \left( \hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left( \hat{p}_j - \frac{e}{c} A_j \right) = \\ &= \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + i\sigma_k e_{ijk} \left( \hat{p}_i \hat{p}_j - \frac{e}{c} \hat{p}_i A_j - \frac{e}{c} A_i \hat{p}_j - \frac{e^2}{c^2} A_i A_j \right). \end{aligned}$$

Заметим, что

$$\hat{p}_i A_j = -i\hbar(\nabla_i A_j(\mathbf{r}, t)) + A_j \hat{p}_i.$$

Все слагаемые, представляющие собой свертки симметричных тензоров  $\hat{p}_i \hat{p}_j$ ,  $(A_j \hat{p}_i + A_i \hat{p}_j)$  и  $A_i A_j$  с антисимметричным тензором  $e_{ijk}$ , обращаются в нуль. Соответственно результат преобразования имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \sigma \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) &= \\ &= \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + i \sigma_k e_{ijk} \left( -\frac{e}{c} \right) (-i \hbar (\nabla_i A_j)) = \\ &= \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e \hbar}{c} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}, \end{aligned}$$

где  $\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}$  – это напряженность магнитного поля.

Таким образом, мы получили уравнение для 2-компонентной волновой функции  $\phi$  нерелятивистской частицы со спином 1/2 во внешнем электромагнитном поле,

$$i \hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2}{2m} \phi - \frac{e \hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H} \phi + e \Phi \phi,$$

которое называется уравнением Паули. Уравнение Паули имеет тот же вид, что и уравнение Шредингера,

$$i \hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \hat{H} \phi,$$

но гамильтониан Паули,

$$\hat{H} = \frac{\left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2}{2m} - \frac{e \hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H} + e \Phi,$$

представляет собой оператор полной энергии частицы со спином 1/2 во внешнем электромагнитном поле.

В стационарном электрическом поле, когда  $\mathbf{A} = 0$  и  $\mathbf{H} = 0$ , гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r})$$

имеет привычный вид, где

$$U(\mathbf{r}) = e \Phi(\mathbf{r})$$

есть потенциальная энергия частицы с зарядом  $e$ .



Слагаемое в гамильтониане Паули, пропорциональное  $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}$ , естественно интерпретировать как энергию взаимодействия магнитного момента с магнитным полем. Поскольку

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}$$

есть оператор спина, то

$$-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H} = -\frac{e\hbar}{mc}\hat{\mathbf{s}}\mathbf{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{H}.$$

Таким образом, оператор магнитного момента частицы определяется формулой

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} = \frac{e\hbar}{mc}\hat{\mathbf{s}} = \frac{e}{mc}(\hbar\hat{\mathbf{s}}).$$

В общем случае коэффициент пропорциональности между вектором магнитного момента  $\mathbf{M}$  и вектором углового момента  $\mathbf{L}$  называется гиромагнитным отношением. Для системы частиц с массами  $m_i$  и зарядами  $e_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) векторы  $\mathbf{M}$  и  $\mathbf{L}$  имеют вид

$$\mathbf{M} = \sum_i \frac{e_i}{2c} [\mathbf{r}_i \times \mathbf{v}_i], \quad \mathbf{L} = \sum_i m_i [\mathbf{r}_i \times \mathbf{v}_i].$$

Легко видеть, что если  $e_i/m_i = e/m = \text{const}$ , т.е. если отношение заряда к массе для всех частиц одинаково, то

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2mc}\mathbf{L},$$

где коэффициент пропорциональности  $e/2mc$  называют нормальным гиромагнитным отношением.

Согласно уравнению Паули (полученному из уравнения Дирака) коэффициент пропорциональности между магнитным моментом  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$  и собственным угловым моментом (спином)  $\hbar\hat{\mathbf{s}}$  частицы равен  $e/mc$ , т.е. вдвое превышает нормальное гиромагнитное отношение. Соответственно величину  $e/mc$  часто называют аномальным гиромагнитным отношением.

# Лекция 5 Релятивистские поправки второго порядка по $v/c$

## 5.1 Постановка задачи

На предыдущей лекции мы осуществили преобразование уравнения Дирака, предполагая, что оно описывает нерелятивистскую частицу. При этом мы удерживали слагаемые первого порядка по малому параметру  $v/c$ . В результате было получено уравнение Паули. В отсутствие магнитного поля ( $\mathbf{A} = 0$  и  $\mathbf{H} = 0$ ) уравнение Паули переходит в обычное нерелятивистское уравнение Шредингера,

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) \phi,$$

для частицы в стационарном потенциальном поле  $U(\mathbf{r})$ . Если, к примеру, электрон движется в поле неподвижного протона, то

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

Таким образом, согласно теории Дирака не существует никаких поправок первого порядка по  $v/c$  к энергиям стационарных состояний атома водорода (и любой другой системы, где частица движется в стационарном поле  $U$ ).

Такие поправки существуют во втором порядке по малому параметру  $v/c$ . Упростим задачу вычисления этих поправок, взяв в качестве отправной точки уравнение Дирака для релятивистской частицы в стационарном поле  $U(\mathbf{r})$  (магнитного поля нет, т.е.  $\mathbf{A} = 0$  и  $\mathbf{H} = 0$ ):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad \hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2 + U(\mathbf{r}).$$

## 5.2 Уравнение для спинора $\phi$

Гамильтониан  $\hat{H}$  не зависит от  $t$ . Поэтому волновая функция стационарного состояния с энергией  $E$  имеет вид:

$$\Psi_E(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i \frac{Et}{\hbar}},$$

где  $\psi(\mathbf{r})$  есть решение стационарного уравнения:

$$(c\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2 + U(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}).$$

Выполним преобразование этого уравнения, предполагая, что оно описывает нерелятивистскую частицу. Будем удерживать слагаемые второго порядка по  $v/c$ .

В нерелятивистской области имеем

$$E = mc^2 + E', \quad \text{где } |E'| \ll mc^2.$$

Выделим в биспиноре, как обычно, верхнюю и нижнюю компоненты,

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Распишем более подробно стационарное уравнение:

$$c \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \hat{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) \end{pmatrix} + U(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = (mc^2 + E') \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Находим систему уравнений для 2-компонентных спиноров  $\phi(\mathbf{r})$  и  $\chi(\mathbf{r})$ :

$$\begin{cases} c \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \chi + mc^2 \phi + U \phi = mc^2 \phi + E' \phi, \\ c \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \phi - mc^2 \chi + U \chi = mc^2 \chi + E' \chi, \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} c \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \chi + U \phi = E' \phi, \\ c \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \phi = (2mc^2 + E' - U) \chi. \end{cases}$$

Второе из этих уравнений можно представить в следующей форме:

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2mc^2 + E' - U(\mathbf{r})} c \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \phi(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{1}{2mc^2(1 + (E' - U(\mathbf{r}))/2mc^2)} c \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \phi(\mathbf{r}) \simeq \\ &\simeq \frac{1}{2mc} \left( 1 - \frac{E' - U(\mathbf{r})}{2mc^2} \right) \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \phi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Понятно, что

$$|\chi| \ll |\phi|, \quad \text{если } v \ll c,$$

т.е. задача сводится к определению 2-компонентного спинора  $\phi(\mathbf{r})$ .

Первое уравнение системы переписываем так:

$$c \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \frac{1}{2mc} \left( 1 - \frac{E' - U(\mathbf{r})}{2mc^2} \right) \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \phi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) = E' \phi(\mathbf{r}).$$

Легко видеть, что

$$1 - \frac{E' - U(\mathbf{r})}{2mc^2} = \left(1 - \frac{E'}{2mc^2}\right) + \frac{U(\mathbf{r})}{2mc^2},$$

где первое слагаемое в правой части есть постоянная величина. Поэтому имеем

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \left(1 - \frac{E'}{2mc^2}\right) \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} &= \left(1 - \frac{E'}{2mc^2}\right) \sigma_i \sigma_j \hat{p}_i \hat{p}_j = \\ &= \left(1 - \frac{E'}{2mc^2}\right) (\delta_{ij} + i e_{ijk} \sigma_k) \hat{p}_i \hat{p}_j = \left(1 - \frac{E'}{2mc^2}\right) \hat{\mathbf{p}}^2. \end{aligned}$$

Мы воспользовались тем, что свертка симметричного тензора  $\hat{p}_i \hat{p}_j$  с антисимметричным тензором  $e_{ijk}$  равна нулю.

Теперь уравнение для спинора  $\phi$  принимает вид

$$\left(1 - \frac{E'}{2mc^2}\right) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \phi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m} \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \frac{U(\mathbf{r})}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \phi(\mathbf{r}) = E' \phi(\mathbf{r}),$$

или

$$\begin{aligned} \underbrace{\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r})\right)}_{\hat{H}_0} \phi(\mathbf{r}) + \underbrace{\frac{1}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} U(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}}_{\text{рел. поправка}} \phi(\mathbf{r}) = \\ = E' \left(1 + \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m^2 c^2}}_{\text{рел. поправка}}\right) \phi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

### 5.3 Уравнение для спинора $\tilde{\phi}$ , нормированного на единицу

Но! Все не так просто. Условие нормировки биспинора,

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \psi^+ \psi d^3 r = 1$$

или

$$\int (\phi^+ \phi + \chi^+ \chi) d^3 r = 1,$$

в рассматриваемом приближении должно оставаться верным с точностью до слагаемых второго порядка по  $v/c$ . Легко видеть, что если нижнюю компоненту биспинора взять в форме

$$\chi(\mathbf{r}) \simeq \frac{\boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}}{2mc} \phi(\mathbf{r}),$$

то  $\chi^+\chi$  будет иметь как раз второй порядок малости по отношению к  $\phi^+\phi$  (то есть нет необходимости в более точных формулах, связывающих  $\chi$  с  $\phi$ ). Условие нормировки принимает вид

$$\int \left( \phi^+\phi + \phi^+ \frac{\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}}{2mc} \frac{\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}}{2mc} \phi \right) d^3r = 1,$$

или

$$\int \phi^+ \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m^2c^2} \right) \phi d^3r = 1.$$

Мы видим, что в рассматриваемом приближении

$$\langle \phi | \phi \rangle \neq 1.$$

В то же время

$$\langle \phi | \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m^2c^2} \right) | \phi \rangle = 1,$$

т.е. с точностью до слагаемых второго порядка по  $v/c$  имеем

$$\langle \phi | \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right)^2 | \phi \rangle = 1$$

или

$$\left\langle \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \phi \left| \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \phi \right. \right\rangle = 1.$$

Таким образом, естественно ввести 2-компонентную волновую функцию

$$\tilde{\phi}(\mathbf{r}) = \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \phi(\mathbf{r}),$$

нормированную на единицу,

$$\langle \tilde{\phi} | \tilde{\phi} \rangle = 1.$$

Выведем уравнение, определяющее функцию  $\tilde{\phi}(\mathbf{r})$ .

С точностью до слагаемых второго порядка функция  $\phi$  выражается через функцию  $\tilde{\phi}$  следующим образом:

$$\phi(\mathbf{r}) = \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \tilde{\phi}(\mathbf{r}) \equiv \hat{T} \tilde{\phi}(\mathbf{r}), \quad \hat{T} = 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2}.$$

Поэтому для спинора  $\tilde{\phi}$  получим уравнение

$$\hat{H}_0 \hat{T} \tilde{\phi} + \frac{1}{4m^2c^2} (\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}) U(\mathbf{r}) (\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}) \hat{T} \tilde{\phi} = E' \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m^2c^2} \right) \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \tilde{\phi}$$

или

$$\hat{H}_0 \hat{T} \tilde{\phi} + \frac{1}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}) U(\mathbf{r}) (\boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}) \hat{T} \tilde{\phi} = E' \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2 c^2} \right) \tilde{\phi}.$$

Домножая это соотношение на  $\hat{T}$  слева, с той же точностью находим

$$\hat{T} \hat{H}_0 \hat{T} \tilde{\phi} + \frac{1}{4m^2 c^2} \hat{T} (\boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}) U(\mathbf{r}) (\boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}) \hat{T} \tilde{\phi} = E' \tilde{\phi}.$$

Иными словами, мы получили стационарное уравнение Шредингера,

$$\hat{H}' \tilde{\phi}(\mathbf{r}) = E' \tilde{\phi}(\mathbf{r}),$$

для нормированного на единицу спинора  $\tilde{\phi}$ , описывающего нерелятивистскую частицу с энергией  $E'$  в потенциале  $U(\mathbf{r})$ . Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}' = \hat{T} \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) \hat{T} + \frac{1}{4m^2 c^2} \hat{T} (\boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}) U(\mathbf{r}) (\boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}) \hat{T}.$$

Задача состоит в том, чтобы выделить из этого оператора гамильтониан  $\hat{H}_0$  и поправочные слагаемые второго порядка по  $v/c$ .

Первое слагаемое в операторе  $\hat{H}'$  может быть приведено к следующей форме:

$$\begin{aligned} \hat{T} \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) \hat{T} &= \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2 c^2} \right)^2 + \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2 c^2} \right) U(\mathbf{r}) \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2 c^2} \right) \simeq \\ &\simeq \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m^2 c^2} \right) + U(\mathbf{r}) - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2 c^2} U(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r}) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2 c^2} = \\ &= \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3 c^2} - \frac{1}{8m^2 c^2} (\hat{\mathbf{p}}^2 U(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}}^2). \end{aligned}$$

Выполним преобразование оператора  $\hat{\mathbf{p}}^2 U$ :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}^2 U &= \hat{p}_i \hat{p}_i U = \hat{p}_i (\hat{p}_i U) + \hat{p}_i U \hat{p}_i = \\ &= (\hat{\mathbf{p}}^2 U) + (\hat{p}_i U) \hat{p}_i + (\hat{p}_i U) \hat{p}_i + U \hat{\mathbf{p}}^2 = \\ &= (\hat{\mathbf{p}}^2 U) + 2(\hat{p}_i U) \hat{p}_i + U \hat{\mathbf{p}}^2. \end{aligned}$$

Упростим теперь второе слагаемое в операторе  $\hat{H}'$ :

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{4m^2c^2} \hat{T}(\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}})U(\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}})\hat{T} &\simeq \frac{1}{4m^2c^2} (\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}})U(\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}) = \\
 &= \frac{1}{4m^2c^2} (\delta_{ij} + i e_{ijk}\sigma_k) \hat{p}_i U \hat{p}_j = \\
 &= \frac{1}{4m^2c^2} (\delta_{ij} + i e_{ijk}\sigma_k) ((\hat{p}_i U) \hat{p}_j + U \hat{p}_i \hat{p}_j) = \\
 &= \frac{1}{4m^2c^2} ((\hat{p}_i U) \hat{p}_i + i \sigma_k e_{ijk} (\hat{p}_i U) \hat{p}_j + U \hat{\mathbf{p}}^2).
 \end{aligned}$$

Таким образом, оператор  $\hat{H}'$  с точностью до слагаемых второго порядка по  $v/c$  имеет вид

$$\begin{aligned}
 \hat{H}' = \hat{H}_0 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2} - \frac{1}{8m^2c^2} (\hat{\mathbf{p}}^2 U) - \frac{1}{4m^2c^2} (\hat{p}_i U) \hat{p}_i - \frac{1}{4m^2c^2} U \hat{\mathbf{p}}^2 + \\
 + \frac{1}{4m^2c^2} (\hat{p}_i U) \hat{p}_i + \frac{i}{4m^2c^2} \sigma_k e_{ijk} (\hat{p}_i U) \hat{p}_j + \frac{1}{4m^2c^2} U \hat{\mathbf{p}}^2.
 \end{aligned}$$

Легко видеть, что целый ряд слагаемых в полученном выражении сокращается. Окончательный результат имеет вид

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3,$$

где

$$\hat{V}_1 = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}, \quad \hat{V}_2 = -\frac{1}{8m^2c^2} (\hat{\mathbf{p}}^2 U), \quad \hat{V}_3 = \frac{i}{4m^2c^2} \sigma_k e_{ijk} (\hat{p}_i U) \hat{p}_j$$

суть релятивистские поправки к гамильтониану  $\hat{H}_0$ . Влияние этих операторов на энергии стационарных состояний может быть исследовано в рамках теории возмущений.

## 5.4 Физический смысл поправок второго порядка по $v/c$

Оператор  $\hat{V}_1$  может быть интерпретирован как релятивистская поправка к оператору кинетической энергии. В самом деле, кинетическая энергия  $K$  – это разность полной энергии  $E$  и энергии покоя  $mc^2$ . В

нерелятивистском случае получим

$$K = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\mathbf{p}^2}{m^2 c^2}} - mc^2 \simeq$$

$$\stackrel{p/mc \ll 1}{\simeq} mc^2 \left( 1 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m^2 c^2} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^4 c^4} \right) - mc^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3 c^2}.$$

Оператор

$$\hat{V}_2 = -\frac{1}{8m^2 c^2} (\hat{\mathbf{p}}^2 U) = \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta U$$

может быть интерпретирован как поправка к потенциальной энергии, обусловленная невозможностью точной локализации частицы (поправка Дарвина). В том, что точная локализация невозможна, убедимся следующим образом. Предположим, что мы устанавливаем местоположение частицы по результатам ее взаимодействия с электромагнитной волной с частотой  $\omega$  и длиной волны  $\lambda = 2\pi c/\omega$ . Понятно, что неопределенность в определении координаты по порядку величины равна  $\lambda$ . Эта неопределенность не может быть сделана сколь угодно малой. В самом деле, электромагнитная волна – это, с иной точки зрения, поток фотонов с энергиями  $\hbar\omega$ . Если  $\hbar\omega$  достигает величины  $2mc^2$ , то в области масштаба  $\lambda_C$ , где

$$\lambda_C = c \frac{\hbar}{mc^2} = \frac{\hbar}{mc},$$

может образоваться пара: частица и античастица. Величина  $\lambda_C$  называется комптоновской длиной волны частицы массой  $m$ . Таким образом, местоположение частицы не может быть установлено с точностью, лучшей чем  $\lambda_C$ .

Но это означает, что характерная неопределенность потенциальной энергии имеет масштаб

$$\delta U = \langle U(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}) - U(\mathbf{r}) \rangle,$$

где  $\Delta \mathbf{r}$  есть случайное смещение, удовлетворяющее соотношениям

$$\langle \Delta \mathbf{r} \rangle = 0, \quad \langle (\Delta \mathbf{r})_i (\Delta \mathbf{r})_j \rangle = \frac{\delta_{ij}}{3} \langle (\Delta \mathbf{r})^2 \rangle, \quad (\Delta \mathbf{r})^2 \simeq \lambda_C^2.$$

Отсюда находим

$$\delta U \simeq \frac{\hbar^2}{6m^2 c^2} \Delta U,$$

что с точностью до небольшого численного множителя согласуется с видом оператора  $\hat{V}_2$ .



Последняя поправка,  $\hat{V}_3$ , имеет прозрачный смысл в центральном поле  $U = U(r)$ . В этом случае

$$\hat{V}_3 = \frac{i}{4m^2c^2} \sigma_k e_{ijk} (\hat{p}_i U(r)) \hat{p}_j = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \sigma_k e_{ijk} \frac{U'(r)}{r} r_i \hat{p}_j = \frac{\hbar U'(r)}{2m^2c^2 r} \hat{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{L}},$$

где  $\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]$  есть оператор орбитального момента частицы. Оператор  $\hat{V}_3$  называют оператором спин-орбитального взаимодействия.

Происхождение этого взаимодействия можно пояснить так. Пусть частица с зарядом  $e$  и магнитным моментом  $\boldsymbol{\mu} = (e/mc)\hbar\mathbf{s}$  движется в стационарном центральном электрическом поле, которое определяется потенциалом  $\Phi(r)$ , т.е. потенциальная энергия частицы есть  $U(r) = e\Phi(r)$ . Предположим, что в точке  $\mathbf{r}$  частица имеет скорость  $\mathbf{v}$  и, соответственно, угловой (орбитальный) момент

$$\mathbf{L} = m[\mathbf{r} \times \mathbf{v}].$$

Напряженность электрического поля в этой же точке равна

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi(r) = -\frac{\Phi'(r)}{r}\mathbf{r}.$$

В системе покоя частицы имеется магнитное поле, напряженность которого с точностью до слагаемых первого порядка по  $v/c$  определяется формулой

$$\mathbf{H} = \frac{1}{c} [\mathbf{E} \times \mathbf{v}].$$

Таким образом, возникает энергия взаимодействия магнитного момента с магнитным полем,

$$V_m = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{H} = \frac{\hbar e\Phi'(r)}{mc^2r} \mathbf{s}[\mathbf{r} \times \mathbf{v}] = \frac{\hbar U'(r)}{m^2c^2r} \mathbf{s}\mathbf{L},$$

которая с точностью до численного множителя согласуется с видом оператора  $\hat{V}_3$ . Напомним, что само по себе взаимодействие  $-\boldsymbol{\mu}\mathbf{H}$  есть эффект первого порядка по  $v/c$ , так что спин-орбитальное взаимодействие есть, в самом деле, эффект второго порядка по  $v/c$ .

# Лекция 6 Сложение угловых моментов

## 6.1 Частица в центральном поле

В нерелятивистской квантовой механике состояние частицы со спином  $s = 1/2$  в центральном поле  $U(r)$  определяется решением стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}_0\phi = E\phi, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r).$$

Поскольку гамильтониан  $\hat{H}_0$  не содержит спиновых операторов, то нормированный на единицу спинор  $\phi$ ,

$$\int \phi^\dagger \phi d^3r = 1,$$

может быть представлен в виде произведения координатной волновой функции  $\psi$  и спинора  $\chi$ , не зависящего от координат,

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

Гамильтониан  $\hat{H}_0$ , далее, коммутирует с операторами  $\hat{\mathbf{I}}^2$  и  $\hat{l}_z$ . Поэтому волновая функция ищется в форме

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

где

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | lm \rangle$$

есть собственный вектор операторов  $\hat{\mathbf{I}}^2$  и  $\hat{l}_z$  в координатном представлении (сферическая гармоника). Напомним, что

$$\hat{\mathbf{l}} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar} = \frac{[\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]}{\hbar} = -i[\mathbf{r} \times \nabla]$$

есть безразмерный оператор орбитального момента. В качестве спинора  $\chi$  обычно выбирают собственный вектор  $|s\sigma\rangle$  операторов  $\hat{\mathbf{s}}^2$  и  $\hat{s}_z$ .

Можно рассуждать иначе. Поскольку гамильтониан  $\hat{H}_0$  нерелятивистской частицы в центральном поле коммутирует с операторами  $\hat{\mathbf{I}}^2$ ,  $\hat{l}_z$ ,  $\hat{\mathbf{s}}^2$  и  $\hat{s}_z$ , то собственный вектор  $\hat{H}_0$  естественно искать в классе собственных векторов этих операторов, так что

$$\phi = R(r)|lm\rangle|s\sigma\rangle.$$

На предыдущей лекции мы показали, что имеются релятивистские поправки к гамильтониану частицы в центральном поле, а именно:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3,$$

где

$$\hat{V}_1 = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}, \quad \hat{V}_2 = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta U(r), \quad \hat{V}_3 = \frac{\hbar^2 U'(r)}{2m^2c^2r} \hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{l}}.$$

Легко видеть, что поправки  $\hat{V}_1$  и  $\hat{V}_2$  сохраняют центральный характер гамильтониана, т.е. коммутируют с операторами  $\hat{\mathbf{l}}^2$ ,  $\hat{l}_z$ ,  $\hat{\mathbf{s}}^2$  и  $\hat{s}_z$ . Но это не так для оператора  $\hat{V}_3$  или, как его еще иначе называют, для оператора спин-орбитального взаимодействия

$$\hat{V}_3 \equiv \hat{U}_{\text{с. о.}} = f(r) \hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{l}}, \quad f(r) = \frac{\hbar^2 U'(r)}{2m^2c^2r}.$$

В самом деле,

$$[\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{l}}^2] = [\hat{s}_x\hat{l}_x + \hat{s}_y\hat{l}_y + \hat{s}_z\hat{l}_z, \hat{\mathbf{l}}^2] = 0, \quad \text{т.к.} \quad [\hat{l}_i, \hat{\mathbf{l}}^2] = 0,$$

и аналогично

$$[\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{s}}^2] = [\hat{s}_x\hat{l}_x + \hat{s}_y\hat{l}_y + \hat{s}_z\hat{l}_z, \hat{\mathbf{s}}^2] = 0, \quad \text{т.к.} \quad [\hat{s}_i, \hat{\mathbf{s}}^2] = 0.$$

В то же время

$$[(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{l}}), \hat{l}_z] = [\hat{s}_x\hat{l}_x, \hat{l}_z] + [\hat{s}_y\hat{l}_y, \hat{l}_z] + \underbrace{[\hat{s}_z\hat{l}_z, \hat{l}_z]}_0 = -i\hat{s}_x\hat{l}_y + i\hat{s}_y\hat{l}_x \neq 0,$$

а также

$$[(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{l}}), \hat{s}_z] = [\hat{s}_x\hat{l}_x, \hat{s}_z] + [\hat{s}_y\hat{l}_y, \hat{s}_z] + \underbrace{[\hat{s}_z\hat{l}_z, \hat{s}_z]}_0 = -i\hat{s}_y\hat{l}_x + i\hat{s}_x\hat{l}_y \neq 0.$$

Заметим, однако, что, сложив две последние формулы, мы получим

$$[\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{l}}, \hat{s}_z + \hat{l}_z] = 0.$$

Естественно, поэтому, ввести оператор

$$\mathbf{j} = \mathbf{s} + \mathbf{l},$$

который имеет смысл оператора полного углового момента. Мы доказали, что

$$[\hat{U}_{\text{с. о.}}, \hat{\mathbf{l}}^2] = 0, \quad [\hat{U}_{\text{с. о.}}, \hat{\mathbf{s}}^2] = 0, \quad [\hat{U}_{\text{с. о.}}, \hat{j}_z] = 0.$$

Итак, гамильтониан частицы в центральном поле с учетом релятивистских поправок можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}'_0 + \hat{U}_{\text{s. o.}},$$

где  $\hat{H}'_0$  есть центральная часть гамильтониана, коммутирующая с операторами  $\hat{\mathbf{I}}^2$ ,  $\hat{l}_z$ ,  $\hat{\mathbf{s}}^2$  и  $\hat{s}_z$ . Очевидно, что  $\hat{H}'_0$  коммутирует с оператором  $\hat{j}_z$ . Таким образом, гамильтониан  $\hat{H}$  коммутирует с операторами  $\hat{\mathbf{I}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{s}}^2$  и  $\hat{j}_z$ . Убедимся теперь в том, что  $\hat{H}$  коммутирует также с оператором  $\hat{\mathbf{j}}^2$ .

Этот оператор может быть представлен в форме

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = (\hat{\mathbf{s}} + \hat{\mathbf{I}})^2 = \hat{\mathbf{s}}^2 + 2\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{I}}^2.$$

Коммутация с  $\hat{\mathbf{I}}^2$  и  $\hat{\mathbf{s}}^2$  уже доказана. Далее, оператор  $\hat{H}'_0$  коммутирует с оператором  $\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{I}} = \hat{s}_x\hat{l}_x + \hat{s}_y\hat{l}_y + \hat{s}_z\hat{l}_z$  просто потому, что коммутирует с каждым из операторов  $\hat{l}_i$  и  $\hat{s}_j$  по отдельности. В то же время оператор  $\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{I}}$  – это и есть оператор  $\hat{U}_{\text{s. o.}}$  с точностью до центрального множителя  $f(r)$ . Поэтому

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{j}}^2] = 0.$$

Итак, гамильтониан  $\hat{H}$  частицы в центральном поле  $U(r)$ , включающий в себя релятивистские поправки, коммутирует с операторами  $\hat{\mathbf{I}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{s}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{j}}^2$  и  $\hat{j}_z$ . Следовательно возникает задача сложения угловых моментов, т.е. поиска собственных векторов операторов  $\hat{\mathbf{j}}^2$  и  $\hat{j}_z$ .

## 6.2 Постановка общей задачи

Пусть имеются две системы с угловыми моментами  $j_1$  и  $j_2$ , соответственно. Каждая из систем определена в собственном конфигурационном пространстве, поэтому

$$[\hat{j}_{1i}, \hat{j}_{2j}] = 0, \quad \text{для } \forall i, j.$$

Состояние первой системы определяется собственными векторами  $|j_1 m_1\rangle$  операторов  $\hat{\mathbf{J}}_1^2$  и  $\hat{j}_{1z}$ ,

$$\hat{\mathbf{J}}_1^2|j_1 m_1\rangle = j_1(j_1 + 1)|j_1 m_1\rangle, \quad \hat{j}_{1z}|j_1 m_1\rangle = m_1|j_1 m_1\rangle,$$

где  $m_1 = j_1, j_1 - 1, \dots, -j_1$ . Аналогичным образом для второй системы имеем

$$\hat{\mathbf{J}}_2^2|j_2 m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)|j_2 m_2\rangle, \quad \hat{j}_{2z}|j_2 m_2\rangle = m_2|j_2 m_2\rangle,$$

где  $m_2 = j_2, j_2 - 1, \dots, -j_2$ .

Объединенная система, «1 + 2», характеризуется набором коммутирующих операторов  $\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{j}_{1z}, \hat{\mathbf{j}}_2^2$  и  $\hat{j}_{2z}$ . Соответственно состояния объединенной системы описываются векторами

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle.$$

Их всего  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  штук.

Введем оператор полного углового момента систем 1 и 2

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2.$$

Возникает новый набор коммутирующих операторов:  $\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}_2^2, \hat{\mathbf{j}}^2$  и  $\hat{j}_z$ . Пусть  $|jm(j_1 j_2)\rangle$  – это набор общих собственных векторов этих операторов,

$$\hat{\mathbf{j}}_1^2 |jm(j_1 j_2)\rangle = \lambda_1 |jm(j_1 j_2)\rangle, \quad \hat{\mathbf{j}}_2^2 |jm(j_1 j_2)\rangle = \lambda_2 |jm(j_1 j_2)\rangle,$$

$$\hat{\mathbf{j}}^2 |jm(j_1 j_2)\rangle = j(j+1) |jm(j_1 j_2)\rangle, \quad \hat{j}_z |jm(j_1 j_2)\rangle = m |jm(j_1 j_2)\rangle,$$

где собственные значения  $\lambda_1, \lambda_2, j(j+1)$  и  $m$  нам пока неизвестны. На данном этапе мы можем быть уверены только в том, что  $j$  – это, как любой другой угловой момент, целое или полуцелое число, и что при фиксированном  $j$  проекция  $m$  пробегает значения:  $j, j-1, \dots, -j$ .

Задача сложения угловых моментов состоит в том, чтобы по известным  $j_1$  и  $j_2$ , а также по известным  $|j_1 m_1\rangle$  и  $|j_2 m_2\rangle$ , установить, во-первых, значения  $j$  (и, конечно,  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ ) и, во-вторых, вид векторов состояний  $|jm(j_1 j_2)\rangle \equiv |jm\rangle$  (известные значения  $j_1$  и  $j_2$  обычно опускают при записи собственных векторов операторов  $\hat{\mathbf{j}}^2$  и  $\hat{j}_z$ ).

### 6.3 Коэффициенты Клебша–Гордана

Неизвестные векторы состояний  $|j m(j_1 j_2)\rangle$  всегда могут быть представлены в виде разложений по известному базису  $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ , а именно

$$|jm(j_1 j_2)\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle.$$

Коэффициенты разложения  $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm}$  называются коэффициентами Клебша–Гордана. Действуя на эти разложения операторами  $\hat{\mathbf{j}}_1^2$  и  $\hat{\mathbf{j}}_2^2$ , легко устанавливаем их собственные значения:

$$\lambda_1 = j_1(j_1 + 1), \quad \lambda_2 = j_2(j_2 + 1).$$

Дальнейшее исследование разобьем на пункты.

1) Воспользуемся тем, что  $\hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$ . Действуя оператором  $\hat{j}_z$  на левую часть выписанного разложения, а оператором  $\hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$  - на правую часть, находим

$$m|jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} (m_1 + m_2) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle.$$

Откуда следует, что

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} \equiv 0, \quad \text{если } m \neq m_1 + m_2,$$

или, иначе,

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} \neq 0, \quad \text{только если } m = m_1 + m_2.$$

Это означает, что суммирование в разложении реально осуществляется только по одному индексу,

$$|jm\rangle = \sum_{m_1} C_{j_1 m_1 j_2 (m-m_1)}^{jm} |j_1 m_1\rangle |j_2 m - m_1\rangle.$$

2) С одной стороны,  $m_{\max} = j_{\max}$ . С другой стороны,  $m_{\max} = m_{1\max} + m_{2\max} = j_1 + j_2$ . Следовательно,  $j_{\max} = j_1 + j_2$ .

Легко понять, что при  $j = j_{\max}$  и  $m = m_{\max} = j_{\max}$  разложение сводится к одному единственному слагаемому, в котором  $m_1 = m_{1\max} = j_1$  и  $m_2 = m_{2\max} = j_2$ ,

$$|j_{\max} j_{\max}\rangle = C_{j_1 j_1 j_2 j_2}^{j_1+j_2, j_1+j_2} |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle \Rightarrow C_{j_1 j_1 j_2 j_2}^{j_1+j_2, j_1+j_2} = 1.$$

3) Установим теперь значение  $j_{\min}$ . Естественно предположить, что  $j_{\min} = |j_1 - j_2|$ . Докажем это следующим образом. Пусть  $j_2 \leq j_1$  и  $j_{\min} = j_1 - j_2$ . Тогда общее количество собственных векторов  $|jm\rangle$  определяется суммой

$$\begin{aligned} \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) &= 2 \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} j + \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} 1 = \\ &= 2(2j_2+1) \frac{(j_1-j_2) + (j_1+j_2)}{2} + (2j_2+1) = (2j_1+1)(2j_2+1). \end{aligned}$$

Так, конечно, и должно быть.

Итак, мы установили, что собственные векторы операторов  $\hat{\mathbf{j}}_1^2$ ,  $\hat{\mathbf{j}}_2^2$ ,  $\hat{\mathbf{j}}^2$  и  $\hat{j}_z$  определяются разложениями

$$|jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle.$$

При этом число  $j$  (полный угловой момент объединенной системы) меняется от  $|j_1 - j_2|$  до  $j_1 + j_2$ , т.е. возможными значениями  $j$  являются  $|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2$ . Для каждого фиксированного  $j$  проекция  $m$  полного углового момента на ось  $z$  принимает значения  $j, j - 1, \dots, -j$ . Таким образом, задача сложения угловых моментов полностью сводится к определению численных значений коэффициентов Клебша–Гордана. Одно из этих значений нам уже известно,

$$C_{j_1 j_1 j_2 j_2}^{j_1 + j_2, j_1 + j_2} = 1.$$

Для установления всех остальных значений может быть использован способ, который мы продемонстрируем на примере, когда  $j_1 = 1/2$  и  $j_2 = 1/2$ .

## 6.4 Пример: сложение моментов 1/2 и 1/2

Вычислим коэффициенты Клебша–Гордана для случая, когда складываются угловые моменты (спины)  $s_1 = 1/2$  и  $s_2 = 1/2$ . Собственные векторы операторов  $\hat{s}_1^2$ ,  $\hat{s}_{1z}$ ,  $\hat{s}_2^2$  и  $\hat{s}_{2z}$  имеют вид

$$|\frac{1}{2}\sigma_1\rangle |\frac{1}{2}\sigma_2\rangle, \quad \underbrace{\sigma_1 = \pm \frac{1}{2}, \quad \sigma_2 = \pm \frac{1}{2}}_{\text{всего 4 вектора}}.$$

Пусть

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2,$$

тогда собственными векторами операторов  $\hat{s}_1^2$ ,  $\hat{s}_2^2$ ,  $\hat{\mathbf{S}}^2$  и  $\hat{S}_z$  являются

$$|SS_z\rangle, \quad \underbrace{S = 0, S_z = 0, \quad S = 1, S_z = 1, 0, -1}_{\text{новые 4 вектора}}.$$

По общему правилу новые векторы состояний выражаются через старые векторы состояний следующим образом:

$$|SS_z\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} C_{\frac{1}{2}\sigma_1 \frac{1}{2}\sigma_2}^{SS_z} |\frac{1}{2}\sigma_1\rangle |\frac{1}{2}\sigma_2\rangle.$$

Удобно ввести сокращенные обозначения для спиноров:

$$\alpha = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \quad \beta = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle.$$

Известно, что

$$C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{11} = 1.$$

Поэтому вектор  $|11\rangle$  имеет вид

$$|11\rangle = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \equiv \alpha(1)\alpha(2).$$

Для определения других коэффициентов Клебша–Гордана введем оператор понижения

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y = (\hat{s}_{1x} + \hat{s}_{2x}) - i(\hat{s}_{1y} + \hat{s}_{2y}) = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}$$

и подействуем этим оператором на состояние  $|11\rangle$ ,

$$\hat{S}_- |11\rangle = \left( \hat{s}_{1-} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left( \hat{s}_{2-} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right).$$

Напомним, что ранее из коммутационных соотношений для операторов углового момента было получено:

$$\hat{j}_{\pm} |j m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j m \pm 1\rangle.$$

Пользуясь этой формулой, находим

$$\hat{S}_- |11\rangle = \sqrt{(1+1)(1-1+1)} |10\rangle = \sqrt{2} |10\rangle,$$

а также

$$\hat{s}_{1-} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle.$$

Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\beta(1)\alpha(2) + \alpha(1)\beta(2)). \end{aligned}$$

Это означает, что

$$C_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{10} = C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$



Подействуем теперь оператором  $\hat{S}_-$  на вектор состояния  $|10\rangle$ ,

$$\hat{S}_-|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left( \hat{s}_{2-} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right) + \left( \hat{s}_{1-} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right).$$

В левой части получим

$$\hat{S}_-|10\rangle = \sqrt{(1+0)(1-0+1)} |1-1\rangle = \sqrt{2} |1-1\rangle,$$

тогда как правая часть примет вид

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right) = \sqrt{2} \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle.$$

Следовательно

$$|1-1\rangle = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \equiv \beta(1)\beta(2),$$

то есть

$$C_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{1-1} = 1.$$

Таким образом, мы получили явные выражения для векторов состояний с полным спином  $S = 1$ ,

$$|11\rangle = \alpha(1)\alpha(2),$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)),$$

$$|1-1\rangle = \beta(1)\beta(2).$$

Найдем теперь те коэффициенты Клебша–Гордана, которые определяют вектор состояния с полным спином  $S = 0$ ,

$$|00\rangle = C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{00} \alpha(1)\beta(2) + C_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{00} \beta(1)\alpha(2).$$

Нужно учесть, во-первых, условие нормировки,

$$\langle 00|00\rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \left| C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{00} \right|^2 + \left| C_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{00} \right|^2 = 1,$$

и, во-вторых, условие ортогональности уже построенным векторам состояний, т.е., в частности,

$$\langle 10|00\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{2}} C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{00} + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{00} = 0.$$

Из этих двух условий находим

$$C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^{00} = -C_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Итак, переход к новым базисным векторам происходит по следующим правилам:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)),$$

$$|11\rangle = \alpha(1)\alpha(2),$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)),$$

$$|1-1\rangle = \beta(1)\beta(2).$$

## Лекция 7 Тожественные частицы. Гелиеподобный атом

### 7.1 Симметрия волновой функции тождественных частиц

Волновая функция одной частицы со спином  $s$ ,  $\Psi(\mathbf{r}, \sigma)$ , имеет смысл амплитуды вероятности найти частицу в точке  $\mathbf{r}$  с проекцией  $\sigma$  спина на выбранное направление (ось  $z$ ). Волновая функция  $N$  частиц,  $\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N)$ , это амплитуда вероятности найти 1-ю частицу в точке  $\mathbf{r}_1$  с проекцией  $\sigma_1$  спина на ось  $z$ , 2-ю частицу в точке  $\mathbf{r}_2$  с проекцией  $\sigma_2$  спина на ось  $z$  и т.д. Удобно ввести сокращенное обозначение

$$x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i),$$

тогда  $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$  есть волновая функция  $N$  частиц.

Пусть  $i$ -я и  $j$ -я частица тождественны (неразличимы). Легко понять, что амплитуды

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad \text{и} \quad \Psi(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N)$$

характеризуют одну и ту же конфигурацию: одна из двух неразличимых частиц находится в точке  $\mathbf{r}_i$  с проекцией  $\sigma_i$  спина на ось  $z$ , а другая – находится в точке  $\mathbf{r}_j$  с проекцией  $\sigma_j$  спина на ось  $z$ . Поэтому волновая функция должна удовлетворять условию

$$|\Psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N)| = |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N)|,$$

или, иначе, две амплитуды, относящиеся к одной и той же конфигурации, могут отличаться только на фазовый множитель,

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = e^{i\varphi} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N).$$

Введем оператор перестановки двух частиц  $\hat{P}_{ij}$ ,

$$\hat{P}_{ij}\Psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = \Psi(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N).$$

Мы показали, что если  $i$ -я и  $j$ -я частицы тождественны, то

$$\hat{P}_{ij}\Psi = P\Psi, \quad |P| = 1.$$

Легко убедиться в том, что число  $P$  может быть равным только 1 или  $-1$ . В самом деле,

$$\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}\Psi = \Psi \quad \Rightarrow \quad P^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad P = \pm 1.$$

Установлено, что предсказания квантовой теории находятся в согласии с экспериментальными фактами, лишь если волновая функция тождественных частиц удовлетворяет дополнительному условию (можно считать его постулатом или законом природы): для частиц с целым спином (бозонов) число  $P$  всегда равно 1, а для частиц с полуцелым спином (фермионов) число  $P$  всегда равно  $-1$ . Другими словами, волновая функция симметрична относительно перестановки координат любых двух тождественных бозонов и антисимметрична относительно перестановки координат любых двух тождественных фермионов.

## 7.2 Гелиеподобный атом

Рассмотрим задачу об описании состояний гелиеподобного атома, считая, что ядро обладает зарядом  $Ze$  и является бесконечно тяжелым. В таком приближении гамильтониан системы (два тождественных электрона в поле точечного ядра) имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Решение уравнения Шредингера,

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2),$$

ищем в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2),$$

поскольку гамильтониан  $\hat{H}$  не содержит спиновых операторов.

Понятно, что в качестве  $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$  можно взять собственные функции операторов  $\hat{s}_1^2$ ,  $\hat{s}_{1z}$ ,  $\hat{s}_2^2$  и  $\hat{s}_{2z}$ , а именно,

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi_{\frac{1}{2}\lambda_1}(\sigma_1)\chi_{\frac{1}{2}\lambda_2}(\sigma_2).$$

Но в соответствии с постулатом о тождественных частицах волновая функция гелиеподобного атома должна удовлетворять условию

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2, \sigma_2, \mathbf{r}_1, \sigma_1)$$

или

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)\chi(\sigma_2, \sigma_1).$$

Легко видеть, что удобно воспользоваться спиновыми функциями  $\chi_{SS_z}(\sigma_1, \sigma_2)$ , отвечающими определенным значениям полного спина  $S$  двух электронов и проекции  $S_z$  этого спина на ось  $z$ ,

$$\chi_{00}(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2)),$$

$$\chi_{11}(\sigma_1, \sigma_2) = \alpha(\sigma_1)\alpha(\sigma_2),$$

$$\chi_{10}(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) + \beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2)),$$

$$\chi_{1-1}(\sigma_1, \sigma_2) = \beta(\sigma_1)\beta(\sigma_2),$$

где

$$\alpha(\sigma) = \langle \frac{1}{2}\sigma | \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle, \quad \beta(\sigma) = \langle \frac{1}{2}\sigma | \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle.$$

В самом деле, функция  $\chi_{SS_z}(\sigma_1, \sigma_2)$  симметрична относительно перестановки  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ , если  $S = 1$ , и антисимметрична, если  $S = 0$ .

Понятно, что полная волновая функция обладает требуемыми свойствами, если координатная волновая функция удовлетворяет условиям

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \quad \text{если } S = 0,$$

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \quad \text{если } S = 1.$$

Таким образом, координатная функция  $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , описывающая состояние с определенной энергией  $E$ , не только должна быть решением стационарного уравнения Шредингера,

$$\hat{H}\Phi = E\Phi,$$

но должна также обладать определенной симметрией по отношению к перестановке координат  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ .

В качестве первого шага естественно воспользоваться стационарной теорией возмущений. Для этого представим гамильтониан гелиеподобного атома в виде суммы,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

гамильтониана  $\hat{H}_0$  двух невзаимодействующих друг с другом электронов,

$$\hat{H}_0 = \hat{H}(1) + \hat{H}(2), \quad \hat{H}(i) = \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i},$$

и оператора  $\hat{V}$  кулоновского отталкивания электронов,

$$\hat{V} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

рассматриваемого как возмущение.

В нулевом приближении

$$\hat{H}_0 \Phi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E^{(0)} \Phi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

Поскольку  $\hat{H}_0$  есть сумма двух гамильтонианов водородоподобных атомов, то, казалось бы,

$$\Phi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{n_1 l_1 m_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{r}_2),$$

и

$$E^{(0)} = E_{n_1} + E_{n_2} = -\frac{Z^2 e^2}{2a} \left( \frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right),$$

где  $a = \hbar^2 / me^2$  есть борковский радиус. Энергия  $E^{(0)}$  принимает минимальное значение при  $n_1 = n_2 = 1$ .

Таким образом, основное состояние (ground state) гелиеподобного атома в нулевом приближении описывается следующей координатной волновой функцией:

$$\Phi_{g.s.}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{1s}(\mathbf{r}_1) \psi_{1s}(\mathbf{r}_2).$$

Эта функция симметрична относительно перестановки  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ . Следовательно в основном состоянии гелиеподобного атома два электрона обладают полным спином  $S = 0$ .

Поправка 1-го порядка к энергии основного состояния определяется следующим матричным элементом:

$$E_{g.s.}^{(1)} = \langle \Phi_{g.s.}^{(0)} | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \Phi_{g.s.}^{(0)} \rangle = \frac{5Ze^2}{8a}.$$

Условием применимости теории возмущений является малость поправки к энергии по отношению к характерному расстоянию между уровнями. В данном случае получим

$$\frac{E_{g.s.}^{(1)}}{E_{g.s.}^{(0)}} = \frac{5}{8Z}.$$

Мы видим, что даже при  $Z = 2$  (атом гелия) отношение мало (хотя и не сильно) по сравнению с единицей. Таким образом, используемый нами подход является пусть грубым, но все же допустимым приближением.

Обсудим в этом же приближении структуру возбужденных состояний гелиеподобного атома. В нулевом приближении для возбужденного состояния имеем:  $n_1 = 1$  и  $n_2 = n > 1$ , что отвечает следующей координатной волновой функции:

$$\Phi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{nlm}(\mathbf{r}_2),$$

или, что приводит к той же энергии,  $n_1 = n > 1$  и  $n_2 = 1$ , и, соответственно,

$$\Phi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{nlm}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2).$$

Легко видеть, что обе выписанные функции не обладают требуемыми свойствами симметрии.

В то же время из этих функций нетрудно составить линейные комбинации, правильным образом меняющиеся при перестановке координат  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ , а именно:

$$\begin{aligned} \Phi_{S=0}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) + \psi_{nlm}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2)), \\ \Phi_{S=1}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) - \psi_{nlm}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2)). \end{aligned}$$

Подчеркнем, что в нулевом приближении состояния, которые описываются этими функциями, вырождены (т.е. обладают одной и той же энергией).

Вычисляя, далее, поправки 1-го порядка к энергиям, находим

$$E^{(1)} = \langle \Phi_S^{(0)} | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \Phi_S^{(0)} \rangle = J \pm K,$$

где значению  $S = 0$  отвечает знак «+», а значению  $S = 1$  — знак «-». При этом

$$J = \langle \psi_{1s}(1)\psi_{nlm}(2) | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \psi_{1s}(1)\psi_{nlm}(2) \rangle,$$

$$K = \langle \psi_{1s}(1)\psi_{nlm}(2) | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \psi_{1s}(2)\psi_{nlm}(1) \rangle.$$

Интеграл  $J$  заведомо положителен;  $K$  — «обменный интеграл» — как можно показать, также положителен. Оба интеграла по порядку величины равны энергии кулоновского отталкивания электронов в гелиеподобном атоме  $\sim Ze^2/a$ , где  $a/Z$  — характерный размер орбиты электрона в водородоподобном атоме с зарядом ядра  $Ze$ .

Итак, пусть в нулевом приближении один электрон находится в состоянии с  $n_1 = 1$ , а второй — в состоянии с  $n_2 = n > 1$ . Можно сказать, что электроны находятся в конфигурации  $(1, n)$ . Мы показали, что энергия электронов, находящихся в определенной конфигурации, очень существенно зависит от того, каков полный спин  $S$  этих двух электронов. Расщепление между уровнями, отвечающим разным значениям  $S$ , имеет порядок энергии кулоновского отталкивания электронов.

На первый взгляд этот результат — существенная зависимость энергии состояния от полного спина  $S$  двух электронов — парадоксален, так как гамильтониан не содержит спиновых операторов. Причина сильного расщепления состояний, принадлежащих одной и той же электронной конфигурации, заключается в том, что состояниям с разными  $S$  отвечают различные симметрии как спиновых, так и координатных волновых функций. Это приводит к существенному различию вкладов кулоновского отталкивания в энергии этих состояний.

## Лекция 8 Сложный атом

### 8.1 Вариационный метод

Пусть для системы с гамильтонианом  $\hat{H}$  задача решена, т.е. найдены энергии  $E_n$  и волновые функции  $\Psi_n$ , такие что:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Волновые функции  $\Psi_n$  ортонормированы,

$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij},$$

и образуют полный базис.

Рассмотрим произвольную волновую функцию  $\Psi$ , нормированную на единицу,

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1.$$

Ее разложение по базису  $\Psi_n$  имеет вид

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n.$$

В силу условия нормировки для коэффициентов  $a_n$  имеем

$$\sum_n |a_n|^2 = 1.$$

Докажем теперь, что средняя энергия  $\langle E \rangle$  системы в состоянии, описываемой произвольной волновой функцией  $\Psi$ , не превышает энергию  $E_0$  основного состояния этой системы,

$$\langle E \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq E_0.$$

В самом деле,

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \left\langle \sum_n a_n \Psi_n \left| \hat{H} \right| \sum_{n'} a_{n'} \Psi_{n'} \right\rangle = \sum_{n, n'} a_n^* a_{n'} E_{nn'} \delta_{nn'} = \\ &= \sum_n E_n |a_n|^2 \geq E_0 \sum_n |a_n|^2 = E_0. \end{aligned}$$

Отсюда также видно, что чем ближе  $\Psi$  к  $\Psi_0$  (чем больше вклад  $|a_0|^2$  в сумму  $\sum_n |a_n|^2$ ), тем ближе  $\langle E \rangle$  к  $E_0$ , и наоборот. Поэтому предлагается следующий алгоритм вычисления волновой функции  $\phi$  основного состояния:

1) выбираем пробную функцию, зависящую от полного набора координат  $q$  и ряда параметров  $\alpha_i$  (вариационных параметров):

$$\phi = \phi(q, \alpha_1, \alpha_2, \dots);$$

2) вычисляем среднюю энергию в состоянии, описываемом данной функцией,

$$\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle \equiv E(\alpha_1, \alpha_2, \dots);$$

3) минимизируя  $E$  по параметрам  $\alpha_i$ , находим соответствующие  $\alpha_i^0$ . После выполнения данной процедуры можно утверждать, что функция  $\phi(q, \alpha_1^0, \alpha_2^0, \dots)$  есть наилучшее приближение к  $\Psi_0(q)$  в выбранном классе функций. Этот метод называют вариационным.



Легко видеть, что абсолютный минимум,  $\langle E \rangle = E_0$ , достигается только в случае, когда функция  $\phi(q, \alpha_1^0, \alpha_2^0, \dots)$  точно совпадает с  $\Psi_0(q)$ , то есть является решением уравнения Шредингера,

$$\hat{H}\Psi_0 = E_0\Psi_0.$$

## 8.2 Основное состояние гелиеподобного атома

В качестве примера рассмотрим задачу о поиске волновой функции основного состояния гелиеподобного атома. На предыдущей лекции в пренебрежении кулоновским отталкиванием электронов мы получили для координатной волновой функции следующее выражение:

$$\Phi_{g.s.}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2) \sim e^{-\frac{Z(r_1+r_2)}{a}}.$$

Нетрудно, однако, сообразить, что кулоновское взаимодействие электронов можно учесть следующим образом. Каждый электрон частично экранирует ядро для другого электрона. Поэтому в волновую функцию основного состояния  $\Phi_{g.s.}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  гелиеподобного атома должен входить эффективный заряд  $Z'$  ядра такой, что  $Z' < Z$ .

Следовательно волновую функцию основного состояния можно искать в виде:

$$\Phi_{g.s.}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = Ce^{-\frac{Z'(r_1+r_2)}{a}},$$

где  $Z'$  – это вариационный параметр, а постоянная  $C$  определяется условием нормировки. Вычисляя среднюю энергию как функцию  $Z'$ ,

$$\langle \Phi_{g.s.} | \hat{H} | \Phi_{g.s.} \rangle = E(Z'),$$

и, затем, минимизируя  $E(Z')$ , находим

$$Z' = Z - \frac{5}{16}.$$

## 8.3 Метод Хартри

Рассмотрим сложный атом (или ион) с  $N$  электронами. Пусть заряд ядра есть  $Ze$ . Гамильтониан такого атома имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|,$$

где

$$\sum_{i < j} \dots = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \dots$$

Энергии и волновые функции стационарных состояний определяются решениями стационарного уравнения Шредингера,

$$\hat{H}\Psi(x_1, x_2 \dots x_N) = E\Psi(x_1, x_2 \dots x_N), \quad x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i).$$

Ищем решение в следующем виде (приближение Хартри):

$$\Psi(x_1, x_2 \dots x_N) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \dots \psi_N(x_N),$$

$$\psi_i(x_i) \equiv \psi_i(i) = \phi_i(\mathbf{r}_i)\chi_{\frac{1}{2}\lambda_i}(\sigma_i),$$

где каждая из функций  $\psi_i(i)$  нормирована на единицу,

$$\int \psi_i^\dagger \psi_i d^3 r_i = 1.$$

Воспользуемся вариационным методом для построения волновой функции основного состояния сложного атома. Для этого сначала вычисляем среднюю энергию атома:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= \sum_{i=1}^N \langle \Psi | \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} | \Psi \rangle + \sum_{i < j} \langle \Psi | \frac{e^2}{r_{ij}} | \Psi \rangle = \\ &= \sum_i \langle \psi_i | \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} | \psi_i \rangle + \sum_{i < j} \langle \psi_i(i)\psi_j(j) | \frac{e^2}{r_{ij}} | \psi_i(i)\psi_j(j) \rangle. \end{aligned}$$

Предположим, что нам известны все  $\psi_i$  кроме одной  $\psi_k$ . Тогда именно эту волновую функцию мы и будем искать с помощью вариационного метода, минимизируя матричный элемент  $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ .

Понятно, что при этом достаточно рассматривать только те вклады в матричный элемент, которые зависят от варьируемой функции  $\psi_k$ , а именно

$$\langle \psi_k | \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_k} | \psi_k \rangle + \sum_{j \neq k} \langle \psi_j(j)\psi_k(k) | \frac{e^2}{r_{jk}} | \psi_j(j)\psi_k(k) \rangle \equiv \langle \psi_k | \hat{H}_k | \psi_k \rangle,$$

где

$$\hat{H}_k = \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j \neq k} \langle \psi_j | \frac{e^2}{r_{jk}} | \psi_j \rangle.$$

Абсолютный минимум матричного элемента  $\langle \psi_k | \hat{H}_k | \psi_k \rangle$  достигается, когда  $\psi_k$  является собственной функцией оператора  $\hat{H}_k$ , отвечающей минимальному собственному значению  $\varepsilon_k$ ,

$$\hat{H}_k \psi_k = \varepsilon_k \psi_k,$$

или

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j \neq k} \langle \psi_j | \frac{e^2}{r_{jk}} | \psi_j \rangle \right) \psi_k(x_k) = \varepsilon_k \psi_k(x_k).$$

Введем эффективный потенциал для  $k$ -го электрона

$$U_k(\mathbf{r}_k) = -\frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j \neq k} \int |\phi_j|^2 \frac{e^2}{r_{jk}} d^3 r_j,$$

тогда

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m} + U_k(\mathbf{r}_k) \right) \psi_k(x_k) = \varepsilon_k \psi_k(x_k).$$

Точно такие же рассуждения можно провести для любого значения индекса  $k = 1, 2, \dots, N$ . Таким образом, мы получили систему из  $N$  уравнений для  $N$  неизвестных функций  $\psi_k(x_k)$ ,

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m} + U_k(\mathbf{r}_k) \right) \psi_k(x_k) = \varepsilon_k \psi_k(x_k), \quad k = 1, 2 \dots N.$$

Каждый потенциал  $U_k$  интегрально зависит от функций  $\psi_j(x_j)$ , где  $j \neq k$ . Поэтому полученная система уравнений называется интегро-дифференциальной системой Хартри.

Эта система решается методом последовательных приближений:

$$\psi_i^{(0)} \rightarrow U_i^{(0)} \rightarrow \psi_i^{(1)} \rightarrow U_i^{(1)} \rightarrow \dots$$

Если эта последовательность сходится, то предел  $\lim_{n \rightarrow \infty} U_i^{(n)} = U_i$  называется самосогласованным полем для  $i$ -го электрона.

## 8.4 Метод Хартри–Фока

Однако правильная волновая функция должна быть антисимметричной относительно перестановки любых координат  $x_i$  и  $x_j$ . В методе Хартри этого нет. Рассмотрим приближение Хартри–Фока, учитывающее антисимметрию волновой функции. Для этого построим антисимметричную волновую функцию из функций  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$  с помощью

определителя Слэтера

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \dots & \psi_1(x_N) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \dots & \psi_2(x_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(x_1) & \psi_N(x_2) & \dots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix}.$$

Легко видеть, что в этом определителе все функции  $\psi_i$  должны быть различными (если две функции совпадают, то определитель обращается в нуль). Таким образом, справедлив принцип Паули: никакие два электрона не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии.

В приближении Хартри–Фока для функции  $\psi_k(x_k)$  получается интегро–дифференциальное уравнение следующего вида:

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j \neq k} \langle \psi_j(j) | \frac{e^2}{r_{jk}} | \psi_j(j) \rangle \right) \psi_k(x_k) - \sum_{j \neq k} \langle \psi_j(j) | \frac{e^2}{r_{jk}} | \psi_k(j) \rangle \psi_j(x_k) = \varepsilon_k \psi_k(x_k).$$

Здесь имеется дополнительное обменное слагаемое. Это слагаемое обычно тем или иным способом заменяют некоторой поправкой к потенциалу,  $U_{\text{обм}}(\mathbf{r}_k)$ , так что эффективный потенциал для  $k$ -го электрона принимает вид

$$U_k(\mathbf{r}_k) = -\frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j \neq k} \langle \psi_j | \frac{e^2}{r_{jk}} | \psi_j \rangle - U_{\text{обм}}(\mathbf{r}_k).$$

## 8.5 Атомные оболочки

Получающиеся потенциалы обычно усредняют по углам для упрощения уравнений. Тогда волновая функция  $\psi_k(x_k)$   $k$ -го электрона является решением стационарного уравнения Шредингера,

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m} + U_k(r_k) \right) \psi_k(x_k) = \varepsilon_k \psi_k(x_k),$$

где эффективный потенциал  $U_k(r_k)$  – это сферически симметричная функция. Следовательно решение можно искать в виде

$$\psi_k(x_k) = R_{n_k l_k}(r_k) Y_{l_k m_k}(\theta_k, \phi_k) \chi_{\frac{1}{2} \lambda_k}(\sigma_k).$$

В соответствии с этими результатами электроны в сложном атоме распределяются по одночастичным состояниям, каждое из которых характеризуется главным квантовым числом  $n$ , орбитальным квантовым числом (орбитальным моментом)  $l$ , магнитным квантовым числом (проекцией орбитального момента на ось  $z$ )  $m$  и проекцией  $\lambda$  спина на ось  $z$ . Основному состоянию атома отвечает минимальная энергия, поэтому электроны заполняют одночастичные состояния последовательно, начиная с самых глубоких. Набор квантовых состояний, отвечающих фиксированным значениям  $n$  и  $l$ , называется атомной оболочкой. При суммировании по всем состояниям оболочки получим

$$\sum_i m_i = 0, \quad \sum_i \lambda_i = 0.$$

Поэтому суммарный орбитальный момент и суммарный спин электронов, полностью заполняющих оболочку, равны нулю.

Следовательно операторы полного орбитального момента и полного спина всех электронов атома,

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_i \hat{\mathbf{l}}_i, \quad \hat{\mathbf{S}} = \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i,$$

реально формируются только из операторов  $\hat{\mathbf{l}}_i$  и  $\hat{\mathbf{s}}_i$  электронов незаполненной оболочки.

## 8.6 Термы атома

Можно показать, что операторы  $\hat{\mathbf{L}}$  и  $\hat{\mathbf{S}}$  коммутируют с гамильтонианом  $\hat{H}$  атома. Поэтому может быть построена общая система собственных векторов операторов  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{\mathbf{S}}^2$  и  $\hat{S}_z$ . Каждый такой собственный вектор,

$$\Psi_{ELL_zSS_z} = |ELL_zSS_z\rangle,$$

определяет состояние атома с энергией  $E$ .

Если в последней  $(nl)$ -оболочке имеется  $k < 2(2l + 1)$  электронов (оболочка не заполнена), то говорят, что основное состояние атома описывается электронной конфигурацией  $(nl)^k$ . При этом, как показало исследование гелиеподобного атома, энергии состояний могут очень существенно зависеть от суммарного спина  $S$  электронов и, по видимому, от их суммарного орбитального момента  $L$ ,

$$E = E(L, S).$$

Состояние атома с определенной энергией и фиксированными  $L$  и  $S$  называется термом атома и описывается символом

$${}^{2S+1}L.$$

Каждый терм вырожден  $(2L+1)(2S+1)$  раз (по квантовым числам  $L_z$  и  $S_z$ ). Полуэмпирическое правило Хунда утверждает, что энергия  $E$  терма минимальна при максимальном возможном  $S$  и (при заданном  $S$ ) максимальном возможном  $L$ .

Введем полный угловой момент электронной оболочки атома

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}.$$

Получим новый набор коммутирующих операторов:  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{S}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{J}}^2$  и  $\hat{J}_z$ . Собственные векторы этих операторов,

$$|EJJ_z(LS)\rangle = \sum_{L_z S_z} C_{LL_z SS_z}^{JJ_z} |ELL_z SS_z\rangle,$$

описывают  $(2L+1)(2S+1)$  вырожденных состояний, принадлежащих терму  ${}^{2S+1}L$ . Напомним, что число  $J$  меняется от  $|L-S|$  до  $L+S$ .

## 8.7 Тонкая структура термов

Примем во внимание спин-орбитальное взаимодействие

$$\hat{U}_{s.o.} = A \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}}.$$

В присутствии  $\hat{U}_{s.o.}$  операторы  $\hat{L}_z$  и  $\hat{S}_z$  не коммутируют с гамильтонианом атома  $\hat{H}$ . Каждый терм при этом, вообще говоря, расщепляется. Или, как говорят, формируется тонкая структура терма.

Возводя определение полного углового момента  $\hat{\mathbf{J}}$  в квадрат, получим

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + 2\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2.$$

Следовательно оператор спин-орбитального взаимодействия может быть представлен в форме

$$\hat{U}_{s.o.} = A \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{2}.$$

Легко видеть, что оператор  $\hat{U}_{s.o.}$  диагонален в базисе  $|EJJ_z(LS)\rangle$ . Поэтому каждое из состояний  $|EJJ_z(LS)\rangle$  сдвигается на энергию (поправку 1-го порядка к энергии  $E$ )

$$\Delta E_J = \langle JJ_z | \hat{U}_{s.o.} | JJ_z \rangle = A \frac{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)}{2}.$$

Эта поправка зависит от  $J$ , но не зависит от  $J_z$ , то есть кратность вырождения уровня с полным угловым моментом  $J$  равна  $2J + 1$ .

Тонкое расщепление терма тем заметнее, чем тяжелее атом, т.е. чем больше заряд ядра  $Ze$ . Действительно, чем больше заряд ядра, тем выше характерные скорости электронов, т.е. тем больше релятивистские поправки к гамильтониану атома.

Заметим, что разность энергий соседних уровней в тонкой структуре терма равна

$$\Delta E_J \equiv E_J - E_{J-1} = A \frac{J(J+1) - J(J-1)}{2} = AJ,$$

так что

$$\Delta E_J \sim J.$$

Этот результат называется правилом интервалов Ланде.

## Лекция 9 Атом в магнитном поле

### 9.1 Гамильтониан сложного атома в магнитном поле

Рассмотрим атом в однородном и постоянном магнитном поле  $\mathbf{H}$ . Это магнитное поле может быть описано векторным потенциалом

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} [\mathbf{H} \times \mathbf{r}], \quad \text{div } \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0.$$

Гамильтониан  $i$ -го электрона имеет вид

$$\hat{H}(i) = \frac{\left(\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}_i\right)^2}{2m} + U_i(\mathbf{r}_i) - \frac{e\hbar}{mc} \hat{\mathbf{s}}_i \mathbf{H}, \quad \mathbf{A}_i = \mathbf{A}(\mathbf{r}_i).$$

Преобразуя первое слагаемое гамильтониана, находим

$$\left(\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}_i\right)^2 = \hat{\mathbf{p}}_i^2 - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{p}}_i \mathbf{A}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2.$$

Здесь

$$\hat{\mathbf{p}}_i \mathbf{A}_i = -i\hbar (\nabla_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)) + \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i,$$

и, так как  $\text{div } \mathbf{A} = 0$ , то

$$\begin{aligned} \left(\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}_i\right)^2 &= \hat{\mathbf{p}}_i^2 - 2\frac{e}{c} \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2 = \hat{\mathbf{p}}_i^2 - \frac{e}{c} [\mathbf{H} \times \mathbf{r}_i] \hat{\mathbf{p}}_i + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2 = \\ &= \hat{\mathbf{p}}_i^2 - \frac{e}{c} [\mathbf{r}_i \times \hat{\mathbf{p}}_i] \mathbf{H} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2 = \hat{\mathbf{p}}_i^2 - \frac{e\hbar}{c} \hat{\mathbf{l}}_i \mathbf{H} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_i^2. \end{aligned}$$

Таким образом, гамильтониан атома в магнитном поле выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_i \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\mathbf{l}}_i \mathbf{H} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}_i^2 + U_i(\mathbf{r}_i) - \frac{e\hbar}{mc} \hat{\mathbf{s}}_i \mathbf{H} \right) + \hat{U}_{s.o.} = \\ &= \sum_i \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U_i(\mathbf{r}_i) \right) + \hat{U}_{s.o.} + \hat{V},\end{aligned}$$

где  $\hat{V}$  есть оператор взаимодействия атома с магнитным полем,

$$\begin{aligned}\hat{V} &= -\frac{e\hbar}{2mc} \sum_i \hat{\mathbf{l}}_i \mathbf{H} - \frac{e\hbar}{mc} \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i \mathbf{H} + \frac{e^2}{2mc} \sum_i \mathbf{A}_i^2 = \\ &= -\frac{e\hbar}{2mc} \hat{\mathbf{L}} \mathbf{H} - \frac{e\hbar}{mc} \hat{\mathbf{S}} \mathbf{H} + \frac{e^2}{2mc} \sum_i \mathbf{A}_i^2 = \\ &= \mu_B (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathbf{H} + \frac{e^2}{2mc} \sum_i \mathbf{A}_i^2.\end{aligned}$$

Здесь

$$\mu_B = \frac{(-e)\hbar}{2mc} > 0$$

есть магнетон Бора.

Внешнее поле  $\mathbf{H}$ , как правило, мало по сравнению с полями внутри атома. Поэтому, по-видимому, можно пренебречь теми слагаемыми в операторе  $\hat{V}$ , которые квадратичны по  $\mathbf{A}$  и, следовательно, по  $\mathbf{H}$ , оставив только линейные по  $\mathbf{H}$  члены. Направляя ось  $z$  вдоль  $\mathbf{H}$ , для оператора  $\hat{V}$  находим

$$\hat{V} = \mu_B H (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z).$$

Далее рассмотрим два случая – слабое поле и сильное поле.

## 9.2 Слабое поле (эффект Зеемана)

Магнитное поле называется слабым, если энергия взаимодействия атома с полем мала по сравнению с расщеплением уровней тонкой структуры терма,

$$\mu_B H \ll |E_J - E_{J-1}|.$$

Напомним, что каждый уровень тонкой структуры обладает энергией

$$E_J = E + \Delta E_J,$$



которая складывается из энергии терма  $E = E(L, S)$  и сдвига  $\Delta E_J$ , обусловленного спин-орбитальным взаимодействием  $\hat{U}_{s.o.}$ . В отсутствие магнитного поля каждый уровень тонкой структуры вырожден по квантовому числу  $J_z$ . В магнитном поле уровни тонкой структуры расщепляются (эффект Зеемана). При этом в слабом поле можно пренебречь смешиванием уровней тонкой структуры под действием магнитного поля.

В данном случае удобно представить гамильтониан атома,

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_i \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U_i(\mathbf{r}_i) \right)}_{\hat{H}_0} + \hat{U}_{s.o.} + \hat{V},$$

в виде суммы оператора  $\hat{H}_0$  и возмущения  $\hat{V}$ . Собственные векторы  $|E_J J J_z(LS)\rangle$  гамильтониана  $\hat{H}_0$  описывают уровни тонкой структуры терма в отсутствие магнитного поля. Если оператор  $\hat{V}$  диагонален в базисе

$$|J J_z\rangle = |E_J J J_z(LS)\rangle,$$

то каждое состояние  $|J J_z\rangle$  смещается на энергию (поправку 1-го порядка к энергии  $E_J$ ):

$$\Delta E_{J J_z} = \langle J J_z | \hat{V} | J J_z \rangle.$$

Для матрицы оператора  $\hat{V}$  в базисе  $|J J_z\rangle$  имеем

$$\begin{aligned} \langle J J_z | \hat{V} | J J'_z \rangle &= \mu_B H \langle J J_z | \hat{L}_z + 2\hat{S}_z | J J'_z \rangle = \\ &= \mu_B H \langle J J_z | \hat{J}_z + \hat{S}_z | J J'_z \rangle = \mu_B H \left( J_z \delta_{J_z J'_z} + \langle J J_z | \hat{S}_z | J J'_z \rangle \right). \end{aligned}$$

Пользуясь свойствами коэффициентов Клебша-Гордана, легко установить, что оператор  $\hat{S}_z$  диагонален в базисе  $|J J_z\rangle$ . В самом деле,

$$\begin{aligned} \langle J J_z | \hat{S}_z | J J'_z \rangle &= \sum_{L_z, S_z} C_{LL_z SS_z}^{JJ_z} \sum_{L'_z, S'_z} C_{LL'_z SS'_z}^{JJ'_z} \langle L_z S_z | \hat{S}_z | L'_z S'_z \rangle = \\ &= \sum_{L_z, S_z} C_{LL_z SS_z}^{JJ_z} C_{LL_z SS_z}^{JJ'_z} S_z = \delta_{J_z J'_z} \sum_{L_z, S_z} (C_{LL_z SS_z}^{JJ_z})^2 S_z. \end{aligned}$$

Таким образом, матрица

$$\langle J J_z | \hat{V} | J J'_z \rangle = \mu_B H \left( J_z + \sum_{L_z, S_z} (C_{LL_z SS_z}^{JJ_z})^2 S_z \right) \delta_{J_z J'_z}$$

действительно диагональна.

Мы видим, что сдвиг  $\Delta E_{JJ_z}$  состояния  $|JJ_z\rangle$  зависит от среднего значения  $S_z$ ,

$$\langle JJ_z|\hat{S}_z|JJ_z\rangle = \sum_{L_z, S_z} (C_{LL_zSS_z}^{JJ_z})^2 S_z,$$

в этом состоянии. Явное выражение для этого среднего значения можно получить следующим образом.

Ясно, что в состоянии  $|JJ_z\rangle$  среднее значение вектора спина  $\mathbf{S}$  прямо пропорционально среднему значению вектора полного углового момента  $\mathbf{J}$ ,

$$\langle JJ_z|\hat{\mathbf{S}}|JJ_z\rangle = C \langle JJ_z|\hat{\mathbf{J}}|JJ_z\rangle,$$

или, иначе,

$$\langle JJ_z|\hat{S}_\alpha|JJ_z\rangle = C \langle JJ_z|\hat{J}_\alpha|JJ_z\rangle, \quad \alpha = x, y \text{ или } z.$$

Естественно предположить, что тот же численный множитель  $C$  входит в соотношение

$$\langle JJ_z|\hat{J}_\alpha\hat{S}_\alpha|JJ_z\rangle = C \langle JJ_z|\hat{J}_\alpha\hat{J}_\alpha|JJ_z\rangle,$$

связывающее средние значения  $\mathbf{JS}$  и  $\mathbf{J}^2$ . Но из определения

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$$

легко получить:

$$\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{L}} \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{J}}^2 - 2\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2,$$

так что

$$\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2}{2}.$$

Поэтому коэффициент  $C$  определяется выражением

$$C = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

Следовательно

$$\langle JJ_z|\hat{S}_z|JJ_z\rangle = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} J_z.$$

Для сдвига энергии находим

$$\Delta E_{JJ_z} = \mu_B H J_z \left( 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \right)$$

или

$$\Delta E_{JJ_z} = \mu_B H g(J) J_z,$$

где

$$g(J) = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

есть фактор Ланде.

Интервалы между расщепленными подуровнями определяются величиной

$$\mu_B H g(J),$$

т.е. эти интервалы, вообще говоря, различны для уровней тонкой структуры с разными  $J$ . Чтобы подчеркнуть удивительность этого результата, говорят об аномальном эффекте Зеемана. Если по каким-либо причинам  $g(J) = 1$ , так что интервалы между состояниями равны  $\mu_B H$ , то эффект Зеемана называют нормальным.

### 9.3 Сильное поле (эффект Пашена–Бака)

Рассмотрим теперь случай сильного поля, когда

$$\mu_B H \gg |E_J - E_{J-1}|,$$

то есть оператор взаимодействия атома с полем  $\hat{V}$  существенно превосходит оператор спин-орбитального взаимодействия  $\hat{U}_{s.o.}$ . Тогда в гамильтониане атома,

$$\hat{H} = \sum_i \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right) + \hat{U}_{s.o.} + \hat{V},$$

оператором  $\hat{U}_{s.o.}$  можно пренебречь. Следовательно гамильтониан атома в сильном магнитном поле принимает вид

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_i \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U_i(\mathbf{r}_i) \right)}_{\hat{H}_0} + \hat{V},$$

где

$$\hat{V} = \mu_B H (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z).$$

Легко установить, что возмущение  $\hat{V}$  диагонально в базисе собственных векторов

$$|L_z S_z\rangle = |ELL_z SS_z\rangle$$

оператора  $\hat{H}_0$ . В самом деле,

$$\begin{aligned}\langle L_z S_z | \hat{V} | L'_z S'_z \rangle &= \mu_B H \langle L_z S_z | \hat{L}_z + 2\hat{S}_z | L'_z S'_z \rangle = \\ &= \mu_B H (L_z + 2S_z) \delta_{L_z L'_z} \delta_{S_z S'_z}.\end{aligned}$$

Поэтому каждое состояние  $|L_z S_z\rangle$  сдвигается на энергию

$$\Delta E_{L_z S_z} = \langle L_z S_z | \hat{V} | L_z S_z \rangle = \mu_B H (L_z + 2S_z).$$

Таким образом, в сильном магнитном поле интервалы между расщепленными подуровнями равны  $\mu_B H$  (эффект Пашена-Бака).

## 9.4 Диамагнетизм инертных газов

У атомов инертных газов полностью заполнены электронные оболочки, поэтому в основном состоянии

$$S = 0, \quad L = 0, \quad J = 0.$$

Оператор взаимодействия атома с магнитным полем выглядит следующим образом:

$$\hat{V} = \mu_B H (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_i \mathbf{A}_i^2.$$

Легко видеть, что первое слагаемое в операторе  $\hat{V}$  в 1-м и 2-м (в действительности, в любом) порядках теории возмущений не приводит к сдвигу основного состояния атома. Следовательно изменение энергии основного состояния определяется вторым слагаемым в  $\hat{V}$ , квадратичным по  $\mathbf{H}$ . В 1-м порядке теории возмущений находим

$$\begin{aligned}\Delta E &= \langle \Psi_{S=L=J=0} | \frac{e^2}{2mc^2} \sum_i \frac{1}{4} [\mathbf{H} \times \mathbf{r}_i]^2 | \Psi_{S=L=J=0} \rangle = \\ &= \frac{e^2 H^2}{8mc^2} \sum_i \langle \Psi_0 | r_i^2 \sin^2 \theta_i | \Psi_0 \rangle \equiv -\frac{\chi H^2}{2},\end{aligned}$$

где

$$\chi = -\frac{e^2}{4mc^2} \sum_i \langle \Psi_0 | r_i^2 \sin^2 \theta_i | \Psi_0 \rangle < 0$$

есть диамагнитная восприимчивость атома инертного газа.

# Лекция 10 Основы квантовой теории излучения

## 10.1 Квантовое описание свободного электромагнитного поля

В классической физике электромагнитное поле описывается с помощью скалярного потенциала  $\phi(\mathbf{r}, t)$  и векторного потенциала  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ . В случае, когда поле свободно, удобно воспользоваться следующими калибровочными условиями:

$$\phi = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{A} = 0.$$

Напряженности электрического и магнитного полей определяются формулами

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}.$$

Как было показано в лекции о квантовании электромагнитного поля, векторному потенциалу  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  сопоставляется оператор

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} (\hat{a}_{\lambda} \mathbf{e}_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \mathbf{e}_{\alpha}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}).$$

При этом среднее значение векторного потенциала в момент времени  $t$  в точке  $\mathbf{r}$  определяется, как обычно, матричным элементом

$$\langle \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) | \Psi(t) \rangle,$$

где  $|\Psi(t)\rangle$  – вектор состояния электромагнитного поля.

В формуле для  $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$  суммирование ведется по модам  $\lambda$  поля в объеме  $V$ . Каждая мода определяется совокупностью значений  $(\mathbf{k}, \mathbf{e}_{\alpha})$ , где  $\mathbf{k}$  – это волновой вектор, а  $\mathbf{e}_{\alpha}$  – единичный вектор поляризации ( $\mathbf{e}_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha'}^* = \delta_{\alpha\alpha'}$ ). Волна в каждой моде поперечна,  $\mathbf{e}_{\alpha} \perp \mathbf{k}$ , поэтому индекс  $\alpha$  принимает только два значения:  $\alpha = 1, 2$ . Частота волны  $\omega$  однозначно определяется длиной волнового вектора:  $\omega = kc$ . Периодические граничные условия приводят к квантованию составляющих волнового вектора:

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z,$$

где  $L_x, L_y$  и  $L_z$  – это длины сторон прямоугольного параллелепипеда с объемом  $V = L_x L_y L_z$ , а  $n_x, n_y$  и  $n_z$  – целые числа.

Оператор Гамильтона для свободного электромагнитного поля имеет вид

$$\hat{H}_F = \sum_{\lambda} \hat{H}_{F\lambda} = \sum_{\lambda} \hbar\omega(\hat{a}_{\lambda}^+ \hat{a}_{\lambda} + \frac{1}{2}),$$

при этом операторы  $\hat{a}_{\lambda}$  и  $\hat{a}_{\lambda}^+$  удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$[\hat{a}_{\lambda}, \hat{a}_{\lambda'}^+] = \delta_{\lambda\lambda'}.$$

Гамильтониан каждой моды  $\hat{H}_{F\lambda}$  выглядит так же, как гамильтониан линейного гармонического осциллятора. Соответственно решения стационарного уравнения Шредингера для  $\hat{H}_{F\lambda}$  хорошо известны, а именно:

$$\hat{H}_{F\lambda}|n_{\lambda}\rangle = E_{F\lambda}|n_{\lambda}\rangle, \quad E_{F\lambda} = \hbar\omega(n_{\lambda} + \frac{1}{2}), \quad n_{\lambda} = 0, 1, 2, \dots$$

Операторы  $\hat{a}_{\lambda}^+$  и  $\hat{a}_{\lambda}$  называются операторами рождения и уничтожения, поскольку

$$\hat{a}_{\lambda}^+|n_{\lambda}\rangle = \sqrt{n_{\lambda} + 1}|n_{\lambda} + 1\rangle, \quad \hat{a}_{\lambda}|n_{\lambda}\rangle = \sqrt{n_{\lambda}}|n_{\lambda} - 1\rangle.$$

Величину  $n_{\lambda}$  удобно интерпретировать как число фотонов в моде  $\lambda$ . Эту величину называют также числом заполнения моды.

Собственный вектор  $|\Psi_F\rangle$  оператора  $\hat{H}_F$  в общем случае имеет следующий вид:

$$|\Psi_F\rangle = \prod_{\lambda} |n_{\lambda}\rangle \equiv |\{n_{\lambda}\}\rangle.$$

Ему отвечает энергия свободного электромагнитного поля, равная

$$E_F = \sum_{\lambda} \hbar\omega(n_{\lambda} + \frac{1}{2}).$$

Мы видим, что числа заполнения  $n_{\lambda}$  всех мод полностью определяют стационарное состояние свободного электромагнитного поля.

## 10.2 Атом в классическом электромагнитном поле

Пусть атом находится в классическом электромагнитном поле, которое задается векторным потенциалом  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  таким, что

$$\operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0.$$

Гамильтониан атома имеет вид

$$\hat{H} = \sum_j \left( \frac{(\hat{\mathbf{p}}_j - \frac{e}{c} \mathbf{A}_j)^2}{2m} + U_j(r_j) + \mu_B \boldsymbol{\sigma}_j \mathbf{H}_j \right) + \hat{U}_{s.o.},$$

где

$$\mathbf{A}_j = \mathbf{A}(\mathbf{r}_j, t), \quad \mathbf{H}_j = \mathbf{H}(\mathbf{r}_j, t).$$

Здесь

$$\left( \hat{\mathbf{p}}_j - \frac{e}{c} \mathbf{A}_j \right)^2 = \hat{\mathbf{p}}_j^2 - \frac{2e}{c} \mathbf{A}_j \hat{\mathbf{p}}_j + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}_j^2,$$

так как  $\text{div } \mathbf{A} = 0$ . Соответственно для гамильтониана атома в классическом электромагнитном поле получим

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{V},$$

где

$$\hat{H}_A = \sum_j \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + U_j(r_j) \right) + \hat{U}_{s.o.}$$

есть гамильтониан свободного атома, а

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \sum_j \mathbf{A}_j \hat{\mathbf{p}}_j + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_j \mathbf{A}_j^2 + \mu_B \sum_j \boldsymbol{\sigma}_j \mathbf{H}_j$$

есть оператор взаимодействия атома с полем.

### 10.3 Квантовое описание взаимодействия атома и поля

Перейдем теперь к квантовому описанию электромагнитного поля. Тогда полный гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_F + \hat{V},$$

где

$$\hat{H}_A = \sum_j \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + U_j(r_j) \right) + \hat{U}_{s.o.}$$

есть гамильтониан свободного атома,

$$\hat{H}_F = \sum_{\lambda} \hbar \omega (\hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda} + \frac{1}{2})$$

есть гамильтониан свободного электромагнитного поля, а

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \sum_j \hat{\mathbf{A}}_j \hat{\mathbf{p}}_j + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_j \hat{\mathbf{A}}_j^2 + \mu_B \sum_j \boldsymbol{\sigma}_j \hat{\mathbf{H}}_j$$

есть оператор взаимодействия атома и поля. Поскольку речь идет о свободном электромагнитном поле, то

$$\hat{\mathbf{A}}_j = \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_j) = \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} (\hat{a}_{\lambda} \mathbf{e}_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} + \hat{a}_{\lambda}^+ \mathbf{e}_{\alpha}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}),$$

$$\hat{\mathbf{H}}_j = \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}_j) = \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} (i[\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\alpha}] \hat{a}_{\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} - i[\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\alpha}^*] \hat{a}_{\lambda}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}).$$

Собственные векторы  $|k\rangle$  оператора  $\hat{H}_A$ ,

$$\hat{H}_A |k\rangle = E_{Ak} |k\rangle,$$

описывают стационарные состояния атома с энергиями  $E_{Ak}$ . В то же время собственные векторы  $|\{n_{\lambda}\}\rangle$  оператора  $\hat{H}_F$ ,

$$\hat{H}_F |\{n_{\lambda}\}\rangle = E_F |\{n_{\lambda}\}\rangle,$$

описывают стационарные состояния поля с энергиями  $E_F$ . Введем оператор

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_A + \hat{H}_F.$$

Решения стационарного уравнения Шредингера,

$$\hat{H}_0 |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle,$$

имеют вид:

$$|\Psi\rangle = |k\rangle |\{n_{\lambda}\}\rangle, \quad E = E_{Ak} + E_F.$$

Векторы  $|\Psi\rangle$  описывают стационарные состояния не взаимодействующих друг с другом атома и поля.

Наличие оператора взаимодействия  $\hat{V}$  приводит к появлению переходов между этими стационарными состояниями. Пусть, к примеру, в момент  $t = 0$  система "атом + поле" находится в состоянии  $|\Psi_i\rangle$  с энергией

$$E_i = E_{Ai} + E_{Fi}.$$

Вероятность перехода в единицу времени в состояние  $|\Psi_f\rangle$  с энергией

$$E_f = E_{Af} + E_{Ff}$$



в 1-м порядке нестационарной теории возмущений определяется правилом Ферми

$$dw_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle|^2 d\rho(E_f).$$

Заметим, что оператор  $\hat{V}$  взаимодействия атома со свободным электромагнитным полем не зависит от времени. Поэтому в этом переходе полная энергия системы «атом + поле» сохраняется:

$$E_{Ai} + E_{Fi} = E_{Af} + E_{Ff}.$$

Если  $E_{Ai} > E_{Af}$  и  $E_{Fi} < E_{Ff}$ , то атом теряет энергию, а поле приобретает энергию. Это означает, что происходит излучение – в одной или нескольких модах поля появляются дополнительные фотоны. Наоборот, если  $E_{Ai} < E_{Af}$  и  $E_{Fi} > E_{Ff}$ , то происходит поглощение фотонов с возбуждением атома.

## Лекция 11 Спонтанное излучение атома

### 11.1 Постановка задачи

Спонтанное излучение происходит при переходе атома из начального состояния  $|i\rangle$  в конечное состояние  $|f\rangle$  с меньшей энергией при условии, что начальное состояние поля – это основное состояние (во всех модах нет фотонов). Таким образом, начальное и конечное состояния системы «атом + поле» описываются следующими векторами

$$|\Psi_i\rangle = |i\rangle|0, 0 \dots\rangle, \quad |\Psi_f\rangle = |f\rangle|0, 0 \dots 1_{\mathbf{k}\alpha}, 0 \dots\rangle.$$

Переход в атоме  $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$  сопровождается излучением кванта с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и поляризацией  $\mathbf{e}_\alpha$ . Энергия этого кванта (приращение энергии поля  $\Delta E_F$ ) равна разности начальной и конечной энергий атома:

$$\Delta E_F = \hbar\omega = E_{Ai} - E_{Af}.$$

По правилу Ферми для вероятности перехода с излучением кванта в телесный угол  $d\Omega$  вокруг направления  $\mathbf{k}$  имеем

$$dw_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle|^2 d\rho(E_f),$$

где  $d\rho(E_f)$  есть плотность конечных состояний поля.

## 11.2 Оператор взаимодействия атома и поля

В операторе  $\hat{V}$  взаимодействия атома и поля естественно пренебречь квадратичными по полю слагаемыми по сравнению с линейными. Поэтому возмущение  $\hat{V}$  имеет вид

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \sum_j \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_j) \hat{\mathbf{p}}_j + \mu_B \sum_j \sigma_j \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}_j) \equiv \hat{V}_1 + \hat{V}_2.$$

Оценим порядок операторов  $\hat{V}_1$  и  $\hat{V}_2$ . Пользуясь соотношением неопределенностей, для взаимодействия  $V_1$  находим

$$V_1 \sim \frac{e}{mc} A p \sim \frac{e}{mc} A \frac{\hbar}{a},$$

где  $a$  – это боровский радиус. В то же время для взаимодействия  $V_2$  получим

$$V_2 \sim \frac{e\hbar}{mc} k A \sim \frac{e}{mc} A \frac{\hbar\omega}{c},$$

Следовательно  $V_1$  и  $V_2$  соотносятся как  $\hbar/a$  и  $\hbar\omega/c$ . Возьмем  $\hbar\omega$  из закона сохранения энергии при излучении,

$$\frac{\hbar\omega}{c} = \frac{E_{Ai} - E_{Af}}{c} \simeq \frac{e^2}{ca} = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar}{a} \simeq \frac{1}{137} \frac{\hbar}{a} \ll \frac{\hbar}{a}.$$

Таким образом,  $V_2 \ll V_1$ . Оператор возмущения примет вид

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \sum_j \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_j) \hat{\mathbf{p}}_j.$$

Из выполненных оценок следует также, что

$$\hbar k \sim \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar}{a} \Rightarrow ka \sim \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \ll 1.$$

Поскольку  $k \sim 1/\lambda$ , то, следовательно, размер атома,  $a$ , много меньше, чем длина излучаемой волны  $\lambda$ . В классической теории излучения соотношение  $a \ll \lambda$  есть условие применимости дипольного приближения. В квантовой теории, как мы скоро увидим, условие  $ka \ll 1$  также позволяет существенно упростить вычисления.

## 11.3 Плотность конечных состояний

Найдем теперь плотность конечных состояний

$$d\rho = \frac{dN_f}{dE_f}, \quad dE_f = d(\hbar\omega) = \hbar c dk.$$

В пространстве волновых векторов фотонам, излучаемым в телесный угол  $d\Omega$  с неопределенностью энергии  $dE_f$ , отвечает элемент объема  $(k^2 d\Omega) dk$ . С учетом условий квантования составляющих вектора  $\mathbf{k}$  для числа  $dN_f$  состояний поля находим

$$dN_f = \frac{k^2 d\Omega dk}{\left(\frac{2\pi}{L_x}\right) \left(\frac{2\pi}{L_y}\right) \left(\frac{2\pi}{L_z}\right)} = \frac{V k^2 d\Omega dk}{(2\pi)^3}.$$

Следовательно для плотности состояний получим

$$d\rho = \frac{V k^2 d\Omega dk}{(2\pi)^3 \hbar c dk} = \frac{V \omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3}.$$

## 11.4 Вероятность излучения фотона в дипольном приближении

Формула для вероятности излучения в единицу времени фотона в телесный угол  $d\Omega$  вокруг направления  $\mathbf{k}$  с фиксированной поперечной поляризацией  $\mathbf{e}_\alpha$  принимает вид

$$dw_{if}(\mathbf{k}, \mathbf{e}_\alpha) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle|^2 \frac{V \omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3}.$$

Займемся теперь вычислением матричного элемента. Имеем

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle &= \\ &= \langle f | \langle 0, 0 \dots 1_{\mathbf{k}\alpha}, 0 \dots | \left(-\frac{e}{mc}\right) \sum_j \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_j) \hat{\mathbf{p}}_j | 0, 0 \dots \rangle | i \rangle = \\ &= \left(-\frac{e}{mc}\right) \sum_\lambda \sqrt{\frac{2\pi \hbar c^2}{V\omega}} \mathbf{e}_\alpha^* \langle 0, 0 \dots 1_{\mathbf{k}\alpha}, 0 \dots | \hat{a}_\lambda^+ | 0, 0 \dots \rangle \times \\ &\quad \times \sum_j \langle f | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \hat{\mathbf{p}}_j | i \rangle. \end{aligned}$$

Ясно, что в сумме по  $\lambda$  остается единственное слагаемое, соответствующее  $\lambda = (\mathbf{k}, \mathbf{e}_\alpha)$ ,

$$\langle 1_{\mathbf{k}\alpha} | \hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}^+ | 0 \rangle = 1.$$

Поэтому матричный элемент принимает вид

$$\langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle = \left(-\frac{e}{m}\right) \sqrt{\frac{2\pi \hbar}{V\omega}} \mathbf{e}_\alpha^* \sum_j \langle f | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \hat{\mathbf{p}}_j | i \rangle,$$

т.е. выражается через матричный элемент по конечной и начальной волновым функциям атома.

Понятно, что основной вклад в матричный элемент вносит интегрирование по области радиусом порядка  $a$ . Поскольку  $ka \ll 1$ , то мы можем пренебречь экспонентой при операторе импульса. Это и есть дипольное приближение в квантовой теории излучения. Остается вычислить матричный элемент следующего вида:

$$\langle f | \hat{\mathbf{p}}_j | i \rangle.$$

Для этого рассмотрим коммутатор

$$\begin{aligned} [x_j, \hat{H}_A] &= [x_j, \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m}] = [x_j, \frac{\hat{p}_{xj}^2}{2m}] = \\ &= \frac{1}{2m} \hat{p}_{xj} [x_j, \hat{p}_{xj}] + \frac{1}{2m} [\hat{x}_j, \hat{p}_{xj}] \hat{p}_{xj} = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_{xj}. \end{aligned}$$

Таким образом, оператор импульса  $j$ -го электрона можно выразить через коммутатор,

$$\hat{\mathbf{p}}_j = \frac{-im}{\hbar} [\mathbf{r}_j, \hat{H}_A].$$

Подставляя это выражение для  $\hat{\mathbf{p}}_j$  в матричный элемент, находим

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{\mathbf{p}}_j | i \rangle &= \frac{-im}{\hbar} \langle f | \mathbf{r}_j \hat{H}_A - \hat{H}_A \mathbf{r}_j | i \rangle = \\ &= \frac{-im(E_{Ai} - E_{Af})}{\hbar} \langle f | \mathbf{r}_j | i \rangle = -im\omega \langle f | \mathbf{r}_j | i \rangle. \end{aligned}$$

Собирая все вместе, получим

$$\langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle = i\omega e \sum_j \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} \mathbf{e}_\alpha^* \langle f | \mathbf{r}_j | i \rangle = i\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}} \mathbf{e}_\alpha^* \langle f | \hat{\mathbf{d}} | i \rangle,$$

где

$$\hat{\mathbf{d}} = \sum_j e \mathbf{r}_j$$

есть оператор дипольного момента атома. Введем обозначение

$$\langle f | \hat{\mathbf{d}} | i \rangle \equiv \mathbf{d}_{if}.$$

Тогда для матричного элемента от оператора  $\hat{V}$  получаем следующее компактное выражение:

$$\langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle = i\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}} \mathbf{e}_\alpha^* \mathbf{d}_{if}.$$

Это означает, что вероятность излучения фотона с поляризацией  $\mathbf{e}_\alpha$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$  в телесный угол  $d\Omega$  равна

$$dw_{if}(\mathbf{k}, \mathbf{e}_\alpha) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{2\pi\hbar\omega}{V} |\mathbf{e}_\alpha^* \mathbf{d}_{if}|^2 \frac{V\omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{e}_\alpha^* \mathbf{d}_{if}|^2 d\Omega.$$

## 11.5 Суммирование по поляризациям

Если нас не интересует поляризация излучения, то необходимо провести суммирование по двум возможным поляризациям. Удобно выбрать в качестве базисных векторов тройку взаимно ортогональных единичных векторов  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{n})$ , где  $\mathbf{n}$  — это единичный вектор в направлении  $\mathbf{k}$ . Раскладывая по этому базису вектор  $\mathbf{d}_{if}$ , находим

$$\mathbf{d}_{if} = (\mathbf{d}_{if} \mathbf{e}_1^*) \mathbf{e}_1 + (\mathbf{d}_{if} \mathbf{e}_2^*) \mathbf{e}_2 + (\mathbf{d}_{if} \mathbf{n}) \mathbf{n},$$

а также

$$|\mathbf{d}_{if}|^2 = \sum_{\alpha=1,2} |\mathbf{d}_{if} \mathbf{e}_\alpha^*|^2 + |\mathbf{d}_{if} \mathbf{n}|^2.$$

Отсюда получим

$$\sum_{\alpha=1,2} |\mathbf{e}_\alpha^* \mathbf{d}_{if}|^2 = |\mathbf{d}_{if}|^2 - |\mathbf{d}_{if} \mathbf{n}|^2.$$

Следовательно угловое распределение фотонов определяется формулой

$$dw_{if}(\mathbf{k}) = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} (|\mathbf{d}_{if}|^2 - |\mathbf{d}_{if} \mathbf{n}|^2) d\Omega.$$

Полная вероятность перехода в единицу времени (для малых времен) получается интегрированием по всем телесным углам. Удобно воспользоваться формулой для усреднения по углам

$$\langle n_i n_j \rangle \equiv \frac{1}{4\pi} \oint n_i n_j d\Omega = \frac{1}{3} \delta_{ij}.$$

Тогда

$$w_{if} = \oint dw_{if}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \left( |\mathbf{d}_{if}|^2 - \frac{1}{3} |\mathbf{d}_{if}|^2 \right) = \frac{4\omega^3 |\mathbf{d}_{if}|^2}{3\hbar c^3}.$$

## 11.6 Время жизни состояния

Для произвольных времен вероятность  $W(t)$  того, что атом все еще находится в начальном состоянии  $|i\rangle$ , имеет следующий вид:

$$W(t) = e^{-w_{if}t} = e^{-t/\tau}.$$

Величина  $\tau = 1/w_{if}$  называется временем жизни возбужденного состояния  $|i\rangle$  по отношению к переходу в состояние  $|f\rangle$ .

# Лекция 12 Интегральное уравнение теории рассеяния

## 12.1 Постановка задачи рассеяния

Сформулируем задачу рассеяния. Пусть имеется поток падающих (свободных) нерелятивистских частиц, каждая из которых обладает импульсом

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k},$$

направленным вдоль оси Oz. Выберем начало координат в той области, где отличен от нуля рассеивающий потенциал. Предположим, что эта область ограничена радиусом  $a$ , так что

$$U(\mathbf{r}) \equiv 0, \quad \text{если } r > a.$$

Подчеркнем, что внутри сферы радиусом  $a$  потенциал  $U(\mathbf{r})$  имеет произвольную форму. Требуется найти зависимость потока рассеянных частиц от направления рассеяния.

Формально задача описывается уравнением Шредингера,

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}),$$

с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}).$$

В случае, когда  $E < 0$ , речь идет о поиске связанных состояний. Напомним, что волновая функция частицы, находящейся в связанном состоянии, удовлетворяет следующему граничному условию:

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

В нашем же случае, в задаче рассеяния, энергия положительна,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0.$$

Спрашивается: как выглядит граничное условие для  $\psi(\mathbf{r})$ ?

В задаче рассеяния волновая функция частицы, по-видимому, представляет собой суперпозицию падающей плоской волны и рассеянной волны. Рассеянная волна на бесконечности является сферической, так как любая ограниченная область по отношению к бесконечности может быть принята за точку. Следовательно в асимптотике  $r \rightarrow \infty$  волновая функция частицы в задаче рассеяния должна иметь вид

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty.$$

Сферическая волна убывает с ростом  $r$  по закону  $1/r$ , так как вероятность обнаружить частицу (пропорциональная квадрату модуля волновой функции рассеянной частицы) в слое радиуса  $r$  меняется, очевидно, по закону  $1/r^2$ . Углы  $\theta$  и  $\phi$  – это полярный и азимутальный углы, которыми определяется направление радиуса-вектора  $\mathbf{r}$ . Величина  $f(\theta, \phi)$  называется амплитудой рассеяния. Далее в этой лекции мы докажем, что в задаче рассеяния действительно имеется решение уравнения Шредингера с выписанной (пока только угаданной) асимптотикой.

## 12.2 Дифференциальное сечение упругого рассеяния

Регистрация рассеянных частиц под углами  $\theta$  и  $\phi$  осуществляется детектором, охватывающим телесный угол  $d\Omega$ . Скорость счета  $dN/dt$  – это число частиц, попадающих в детектор в единицу времени. Очевидно, что скорость счета детектора пропорциональна потоку рассеянных частиц,

$$\frac{dN}{dt} \sim j_{\text{рас}}.$$

Отношение скорости счета к потоку падающих частиц называется дифференциальным сечением рассеяния,

$$d\sigma = \frac{dN/dt}{j_{\text{пад}}}, \quad [d\sigma] = \text{см}^2.$$

Поскольку энергия частиц при рассеянии на потенциале не меняется, то речь здесь идет об упругом рассеянии.

Плотность тока частиц в квантовой механике определяется формулой

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \equiv \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \nabla \psi - \text{к.с.}),$$

где к.с. – это комплексно сопряженная величина. Для падающего потока имеем

$$j_{\text{пад}} = j_z|_{\psi=e^{ikz}} = \frac{\hbar}{2mi}(e^{-ikz} ik e^{ikz} - \text{к.с.}) = \frac{\hbar}{2mi}(ik - (-ik)) = \frac{\hbar k}{m}.$$

С другой стороны, скорость счета детектора задается выражением

$$\frac{dN}{dt} = j_{\text{рас}} r^2 d\Omega,$$

где

$$j_{\text{рас}} = j_r|_{\psi=f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}} = \frac{\hbar}{2mi} \left( f^* \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( f \frac{e^{ikr}}{r} \right) - \text{к.с.} \right).$$

Пренебрегая в  $j_{\text{рас}}$  слагаемыми, которые убывают при  $r \rightarrow \infty$  быстрее, чем  $1/r^2$ , получим

$$j_{\text{рас}} = \frac{\hbar}{2mi} |f|^2 \left( \frac{ik}{r^2} - \text{к.с.} \right) = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta, \phi)|^2 \frac{1}{r^2}.$$

Таким образом, для дифференциального сечения упругого рассеяния находим

$$d\sigma(\theta, \phi) = \frac{dN/dt}{j_{\text{пад}}} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |f(\theta, \phi)|^2 \frac{1}{r^2} r^2 d\Omega}{\frac{\hbar k}{m}} = |f(\theta, \phi)|^2 d\Omega.$$

Следовательно решение задачи рассеяния сводится к поиску (вычислению) амплитуды рассеяния  $f(\theta, \phi)$ .

## 12.3 Функция Грина задачи рассеяния

Дифференциальное уравнение Шредингера для задачи рассеяния выглядит следующим образом:

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

Домножение обеих частей уравнения на  $2m/\hbar^2$  и перегруппировка слагаемых дает

$$(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \frac{2mU(\mathbf{r})}{\hbar^2} \psi(\mathbf{r}).$$



Результат имеет вид уравнения Гельмгольца с ненулевой правой частью. Ищем решение этого уравнения в виде суммы общего решения  $\psi_0(\mathbf{r})$  однородного уравнения,

$$(\Delta + k^2)\psi_0(\mathbf{r}) = 0,$$

и частного решения  $\psi_1(\mathbf{r})$  неоднородного уравнения,

$$(\Delta + k^2)\psi_1(\mathbf{r}) = \frac{2mU(\mathbf{r})}{\hbar^2} \psi(\mathbf{r}),$$

так что

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \psi_1(\mathbf{r}).$$

Для нахождения частного решения воспользуемся функцией Грина,  $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , которая по определению представляет собой решение следующего уравнения:

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Легко видеть, что

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{2mU(\mathbf{r}')}{\hbar^2} \psi(\mathbf{r}') d^3r'.$$

В самом деле, действуя оператором  $(\Delta + k^2)$  на обе части выписанного соотношения, получим

$$(\Delta + k^2)\psi_1(\mathbf{r}) = \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{2mU(\mathbf{r}')}{\hbar^2} \psi(\mathbf{r}') d^3r' = \frac{2mU(\mathbf{r})}{\hbar^2} \psi(\mathbf{r}).$$

Найдем явное выражение для функции Грина. Для упрощения задачи выберем начало координат таким образом, чтобы вектор  $\mathbf{r}'$  оказался равным нулю, так что

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}).$$

Ищем  $G(\mathbf{r})$  в виде

$$G(\mathbf{r}) = \int A(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3q.$$

Известно, что

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3q.$$

Подставив выписанные выражения в уравнение, получим

$$(-q^2 + k^2)A(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3}.$$

Откуда следует, что

$$A(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3(k^2 - q^2)}.$$

Таким образом, функция Грина определяется интегралом

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{1}{k^2 - q^2} d^3q = \\ &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^2 dq \frac{1}{k^2 - q^2} \int_0^\pi e^{iqr \cos \theta_q} \sin \theta_q d\theta_q. \end{aligned}$$

Осуществляя замену

$$\sin \theta_q d\theta_q = -d \cos \theta_q = -dx$$

и вычисляя интеграл по  $x$ , находим

$$\int_0^\pi e^{iqr \cos \theta_q} \sin \theta_q d\theta_q = \int_{-1}^1 e^{iqr x} dx = \frac{1}{iqr} e^{iqr x} \Big|_{-1}^1 = \frac{1}{iqr} (e^{iqr} - e^{-iqr}).$$

Для  $G(\mathbf{r})$  на данном этапе имеем

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{k^2 - q^2} \frac{1}{iqr} (e^{iqr} - e^{-iqr}) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2 ir} \left( \int_0^\infty \frac{q dq}{k^2 - q^2} e^{iqr} - \int_0^\infty \frac{q dq}{k^2 - q^2} e^{-iqr} \right) = \\ &= \frac{i}{(2\pi)^2 r} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q dq}{q^2 - k^2} e^{iqr}. \end{aligned}$$

Для вычисления этого интеграла воспользуемся теорией вычетов. Поскольку  $r > 0$ , то контур интегрирования следует замкнуть в верхней полуплоскости. Полюсы подынтегрального выражения расположены в точках

$$q = -k, \quad q = k.$$

Существует 4 возможных варианта обхода двух полюсов. Однако только один из них (а именно, тот, где контур интегрирования охватывает только полюс  $q = k$ ) позволяет получить ту функцию Грина, которая приводит к решению с нужной нам асимптотикой. Иначе эту функцию Грина можно получить, выполнив замену

$$k \rightarrow k + i\varepsilon,$$

где  $\varepsilon$  – малая положительная величина. В этом случае имеем

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= \frac{i}{(2\pi)^2 r} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q e^{iqr} dq}{(q - (k + i\varepsilon))(q + (k + i\varepsilon))} = \\ &= \frac{i}{(2\pi)^2 r} 2\pi i \operatorname{Res}\Big|_{q=k+i\varepsilon} \frac{q e^{iqr}}{(q - (k + i\varepsilon))(q + (k + i\varepsilon))} = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}. \end{aligned}$$

Окончательный ответ записан в пределе  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Осуществляя замену  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ , для функции Грина общего вида получим

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

## 12.4 Интегральное уравнение рассеяния

Общее решение уравнения Шредингера,

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \psi_1(\mathbf{r}),$$

принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r'.$$

Это решение является, конечно, формальным. В самом деле, под интегралом в правой части стоит та же неизвестная функция  $\psi(\mathbf{r})$ , что и в левой части. Поэтому правильнее было бы сказать, что мы выполнили переход от дифференциального уравнения Шредингера к эквивалентному интегральному уравнению.

Заметим, что подынтегральное выражение в правой части отлично от нуля только в области, где  $r' < a$ . Следовательно

$$r' < a \ll r \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty,$$

т.е. при переходе к асимптотике  $r \rightarrow \infty$  возникает малый параметр  $r'/r$ . Разложение по этому малому параметру дает

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r - \mathbf{r}' \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r},$$

и

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \simeq \frac{e^{ikr - ik\mathbf{r}' \mathbf{n}}}{r}.$$

Мы пренебрегаем всеми слагаемыми в волновой функции, которые с ростом  $r$  падают быстрее, чем  $1/r$ .

Итак, волновая функция  $\psi(\mathbf{r})$  в асимптотике принимает вид

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r})|_{r \rightarrow \infty} &= \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ikr} e^{-ik\mathbf{nr}'}}{r} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' = \\ &= \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik\mathbf{nr}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r'.\end{aligned}$$

Ранее мы предположили, что волновая функция в асимптотике должна иметь следующую форму:

$$\psi(\mathbf{r})|_{r \rightarrow \infty} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Легко видеть, что, взяв в качестве решения  $\psi_0$  однородного уравнения плоскую волну,

$$\psi_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

мы получим точно то, что и ожидали. При этом амплитуда рассеяния определяется следующей формулой:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik\mathbf{nr}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r'.$$

Таким образом, мы осуществили переход от исходного дифференциального уравнения Шредингера к интегральному уравнению

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r'.$$

В асимптотике  $r \rightarrow \infty$  решение этого уравнения имеет требуемый вид. Само уравнение называют интегральным уравнением теории рассеяния.

## 12.5 Борновское приближение

Рассмотрим отдельно случай, когда потенциал  $U(\mathbf{r})$  мал. Следовательно малым является и вклад второго слагаемого в волновую функцию, так что

$$\psi \simeq \psi_0 = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}.$$

Тогда для амплитуды рассеяния мы получим приближенное выражение

$$f(\theta, \phi) \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') d^3 r'.$$

Здесь  $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}$  есть волновой вектор рассеянной частицы. Данное приближение называется борновским (или, точнее, 1-м борновским приближением).

Условие применимости борновского приближения выглядит следующим образом:

$$|\psi_1| \ll |\psi_0| = 1.$$

Вычисляя для определенности функцию  $\psi_1(\mathbf{r})$  в точке  $\mathbf{r} = 0$  и считая потенциал постоянным в области интегрирования, находим

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} |U| \left| \int \frac{e^{i\mathbf{k}r'}}{r'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} d^3r' \right| \ll 1.$$

Величину  $U$  можно приближённо принять за среднее значение потенциала. Далее возможны два случая.

1) Медленные частицы, для которых  $ka \ll 1$ . В этом случае, опуская все числовые множители, получим

$$\frac{m|U|a^2}{\hbar^2} \ll 1 \quad \Rightarrow \quad |U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}.$$

2) Быстрые частицы, для которых  $ka \gg 1$ . В этом случае под интегралом находится быстро осциллирующая экспонента. Вновь опуская все числовые множители, находим

$$\frac{m|U|a^2}{\hbar^2} \frac{1}{ka} \ll 1 \quad \Rightarrow \quad |U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} ka.$$

## Лекция 13 Метод парциальных волн

### 13.1 Идея метода

Мы продолжаем обсуждение задачи рассеяния. Примем для простоты, что потенциал является сферически симметричным,

$$U = U(r).$$

Как и ранее считаем, что потенциал отличен от нуля лишь в ограниченной области пространства,

$$U(r) \equiv 0, \quad \text{если } r > a.$$

Величину  $a$  естественно назвать радиусом потенциала.

Выпишем стационарное уравнение Шредингера с асимптотическим граничным условием,

$$\begin{cases} \hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), & E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0, \\ \psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}, & r \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Амплитуда рассеяния  $f(\theta)$  не зависит от угла  $\phi$ . В самом деле, ось  $Oz$  выбрана нами вдоль направления движения падающих частиц. Поэтому она является осью аксиальной (цилиндрической) симметрии не только для сферически симметричного потенциала, но и для волновой функции падающих частиц,

$$\psi_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \theta},$$

которая, как видно, не зависит от азимутального угла  $\phi$ . Следовательно волновая функция рассеянных частиц также не зависит от  $\phi$ .

В силу сферической симметрии потенциала имеют место следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{I}}^2] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{l}_z] = 0.$$

Напомним, что  $[\hat{\mathbf{I}}^2, \hat{l}_z] = 0$ , поэтому операторы  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{I}}^2$  и  $\hat{l}_z$  имеют общую систему собственных функций. Следовательно мы вправе искать частные решения уравнения Шредингера в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi).$$

В полярных координатах уравнение Шредингера выглядит следующим образом:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{I}}^2}{r^2} \right) + U(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(\mathbf{r}).$$

Подставляя в него выписанные частные решения, получим

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + U(r) \right) R_l(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} R_l(r).$$

Это уравнение при заданной энергии  $E = \hbar^2 k^2 / 2m > 0$  имеет решения для любого значения орбитального момента,

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

Поэтому общее решение уравнения Шредингера представляет собой суперпозицию частных,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{lm} c_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi).$$

В случае сферически симметричного потенциала, как мы уже выяснили, это решение не зависит от угла  $\phi$ . В то же время имеем

$$Y_{lm}(\theta, \phi) \sim P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}.$$

Таким образом, в суперпозицию следует включать только те частные решения, для которых  $m = 0$ . Соответствующие сферические гармоники имеют вид

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

Включим нормировочные постоянные в радиальные функции  $R_l(r)$  и перепишем общее решение следующим образом:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_l R_l(r) P_l(\cos \theta).$$

Каждое слагаемое в этой сумме называется парциальной волной. Соответственно данный способ построения решения уравнения Шредингера для задачи рассеяния называется методом парциальных волн.

Естественно ожидать, что потенциал  $U(r)$  существенно влияет лишь на конечное число слагаемых в выписанной сумме по  $l$ . В самом деле, пусть  $b$  – это прицельный параметр падающей классической частицы с импульсом  $p = \hbar k$ . Для орбитального момента падающей частицы относительно начала координат имеем

$$bp = \hbar l \quad \Rightarrow \quad b = \frac{l}{k}.$$

Если прицельный параметр частицы  $b$  превосходит радиус потенциала  $a$ , то классическая частица не рассеивается. Соответственно можно ожидать, что парциальные волны с орбитальными моментами такими, что

$$b = \frac{l}{k} > a \quad \Rightarrow \quad l > ka,$$

также не будут испытывать действия потенциала  $U(r)$ .

### 13.2 Сферические функции Бесселя, Неймана и Ганкеля

Радиальную функцию  $R_l(r)$  удобно представить в виде отношения

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r}.$$

Для функции  $u_l(r)$  тогда получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_l''(r) + \left( U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u_l(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} u_l(r)$$

или (после домножения обеих частей уравнения на  $2m/\hbar^2$ )

$$-u_l''(r) + \left( \frac{2mU(r)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l(r) = k^2 u_l(r).$$

Введем безразмерную переменную

$$x = kr.$$

Тогда (после деления на  $k^2$ ) уравнение принимает следующий вид:

$$-u_l''(x) + \left( \frac{2mU(r)}{\hbar^2 k^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} \right) u_l(x) = u_l(x)$$

или

$$u_l''(x) - \left( \frac{2mU(r)}{\hbar^2 k^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} \right) u_l(x) + u_l(x) = 0.$$

Пусть

$$r > a \quad \Rightarrow \quad U(r) = 0.$$

Тогда уравнение для радиальной функции  $u_l(x)$  принимает «универсальный» (одинаковый для любой задачи рассеяния) вид

$$u_l''(x) - \frac{l(l+1)}{x^2} u_l(x) + u_l(x) = 0.$$

Аналогичное «универсальное» уравнение может быть выписано для радиальной функции  $R_l(x) = u_l(x)/x$ .

Если  $l = 0$ , то

$$u_0''(x) + u_0(x) = 0,$$

так что

$$u_0 = \sin x \quad \text{или} \quad u_0 = \cos x.$$



Следовательно

$$R_0(x) = \frac{\sin x}{x} \quad \text{или} \quad R_0(x) = \frac{\cos x}{x}.$$

В случае  $l \geq 1$  решениями соответствующих «универсальных» уравнений (справедливых при  $x > ka$ ) являются следующие функции:

$$R_l(x) = j_l(x) \equiv (-x)^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}$$

или

$$R_l(x) = n_l(x) \equiv (-x)^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x}.$$

Этот результат может быть доказан с помощью метода математической индукции. Функции  $j_l(x)$  и  $n_l(x)$  называются сферическими функциями Бесселя и Неймана соответственно. Их асимптотики выглядят так:

при  $x \rightarrow 0$ ,

$$j_l(x) \rightarrow \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(x) \rightarrow \frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}},$$

где по определению  $(-1)!! = 1$ ;

при  $x \rightarrow \infty$ ,

$$j_l(x) \rightarrow \frac{\sin\left(x - \frac{l\pi}{2}\right)}{x}, \quad n_l(x) \rightarrow \frac{\cos\left(x - \frac{l\pi}{2}\right)}{x}.$$

Сферические функции Бесселя и Неймана представляют собой линейно независимые решения дифференциального уравнения второго порядка для радиальной функции. В качестве двух линейно независимых решений того же уравнения могут быть также взяты две сферические функции Ганкеля  $h_l^{(+)}(x)$  и  $h_l^{(-)}(x)$ , которые определяются следующим образом:

$$h_l^{(\pm)}(x) \equiv j_l(x) \mp i n_l(x).$$

При  $x \rightarrow \infty$  получим

$$\begin{aligned} h_l^{(\pm)}(x) &\rightarrow \frac{1}{x} \left( \sin\left(x - \frac{l\pi}{2}\right) \mp i \cos\left(x - \frac{l\pi}{2}\right) \right) = \\ &= \frac{(\mp i)}{x} e^{\pm i\left(x - \frac{l\pi}{2}\right)} = (\mp i)^{l+1} \frac{e^{\pm ix}}{x}. \end{aligned}$$

Таким образом, в любой задаче рассеяния при  $r > a$  имеем

$$R_l(kr) = A_l h_l^{(-)}(kr) + B_l h_l^{(+)}(kr) = A_l \left( h_l^{(-)}(kr) + S_l h_l^{(+)}(kr) \right).$$

Соответственно волновая функция принимает вид

$$\psi(\mathbf{r})|_{r>a} = \sum_l A_l \left( h_l^{(-)}(kr) + S_l h_l^{(+)}(kr) \right) P_l(\cos \theta).$$

### 13.3 Явное выражение для амплитуды рассеяния

Предположим, что рассеивающий потенциал совершенно отсутствует ( $U \equiv 0$  при всех  $r$ ). Тогда, с одной стороны, волновой функцией является плоская волна

$$\psi_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \theta}.$$

С другой стороны, эта плоская волна должна быть представима в виде суммы парциальных волн при всех  $r \geq 0$ . Соответствующее разложение действительно имеет место и называется формулой Рэлея,

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) = \\ &= \sum_l \frac{2l+1}{2} i^l \left( h_l^{(-)}(kr) + h_l^{(+)}(kr) \right) P_l(\cos \theta). \end{aligned}$$

Мы видим, что в случае  $U \equiv 0$  коэффициенты  $A_l$  и  $S_l$  принимают следующие значения:

$$A_l = \frac{2l+1}{2} i^l, \quad S_l = 1.$$

Рассмотрим теперь общий случай, когда потенциал  $U(r)$  отличен от нуля, но исчезает при  $r > a$ . Тогда в этой же области  $r > a$  волновая функция может быть представлена в форме

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r})|_{r>a} &= \sum_l A_l \left( h_l^{(-)}(kr) + S_l h_l^{(+)}(kr) \right) P_l(\cos \theta) = \\ &= \sum_l A_l \left( h_l^{(-)}(kr) + h_l^{(+)}(kr) \right) P_l(\cos \theta) - \\ &\quad - \sum_l A_l (1 - S_l) h_l^{(+)}(kr) P_l(\cos \theta). \end{aligned}$$

Первая сумма, как мы видели, при надлежащем выборе  $A_l$  превращается в плоскую волну  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ . Возьмем теперь вторую сумму с теми же коэффициентами  $A_l$ ,

$$A_l = \frac{2l+1}{2} i^l,$$

и перейдем к пределу  $r \rightarrow \infty$ . Используя асимптотическую формулу для функции Ганкеля  $h_l^{(+)}(x)$ , находим

$$\begin{aligned} & - \sum_l A_l (1 - S_l) h_l^{(+)}(kr) P_l(\cos \theta) \quad \rightarrow \\ & \rightarrow - \sum_l \frac{2l+1}{2} i^l (1 - S_l) (-i)^{l+1} \frac{e^{ikr}}{kr} P_l(\cos \theta) = \\ & = \left( \frac{i}{2k} \sum_l (2l+1)(1 - S_l) P_l(\cos \theta) \right) \frac{e^{ikr}}{r} = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned}$$

Таким образом, общее решение уравнения Шредингера при  $r > a$ , обладающее правильной асимптотикой, имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r})|_{r>a} &= \sum_l \frac{2l+1}{2} i^l \left( h_l^{(-)}(kr) + S_l h_l^{(+)}(kr) \right) P_l(\cos \theta) = \\ &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \sum_l \frac{2l+1}{2} i^l (1 - S_l) h_l^{(+)}(kr) P_l(\cos \theta) \quad \rightarrow \quad e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \end{aligned}$$

где последний переход соответствует пределу  $r \rightarrow \infty$ . Для амплитуды упругого рассеяния получаем следующее явное выражение (формулу Хольцмарка):

$$f(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_l (2l+1)(1 - S_l) P_l(\cos \theta).$$

На прошлой лекции было показано, что дифференциальное сечение упругого рассеяния определяется формулой

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2.$$

Таким образом, определив  $f(\theta)$ , мы полностью решаем задачу рассеяния.

В методе парциальных волн амплитуда рассеяния  $f(\theta)$  задается набором амплитуд  $S_l$ , где  $l = 0, 1, 2, \dots$ . Численное значение амплитуды  $S_l$

устанавливается следующим образом. В парциальной волне  $l$  находится радиальная функция  $R_l(r)$  на интервале  $0 \leq r \leq a$ . Ее сшивка в точке  $r = a$  с радиальной функцией

$$R_l(r)|_{r>a} = A_l \left( h_l^{(-)}(kr) + S_l h_l^{(+)}(kr) \right)$$

дает  $S_l$ . Расчеты показывают, что при  $l > ka$  амплитуды  $S_l$  становятся близкими к единице, т.е. парциальные волны с  $l > ka$  не испытывают действия потенциала. Это же следует из полуклассических соображений, рассматривавшихся ранее в этой лекции.

## Лекция 14 Неупругое взаимодействие. Оптическая теорема

### 14.1 Полное сечение упругого рассеяния

На прошлой лекции мы рассматривали задачу упругого рассеяния на сферически симметричном потенциале  $U(r)$  с радиусом  $a$ . Мы показали, что вне области действия потенциала волновая функция частицы имеет вид

$$\psi(\mathbf{r})|_{r>a} = \sum_l \frac{2l+1}{2} i^l \left( h_l^{(-)}(kr) + S_l h_l^{(+)}(kr) \right) P_l(\cos \theta),$$

при этом

$$\psi(\mathbf{r})|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Соответственно для дифференциального сечения упругого рассеяния было получено

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| \frac{i}{2k} \sum_l (2l+1)(1 - S_l) P_l(\cos \theta) \right|^2.$$

Полное сечение упругого рассеяния определяется формулой

$$\sigma_e = \oint \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

или

$$\begin{aligned} \sigma_e &= \frac{1}{4k^2} \sum_l (2l+1)(1 - S_l) \sum_{l'} (2l'+1)(1 - S_{l'}^*) \times \\ &\times \oint P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d\phi \sin \theta d\theta. \end{aligned}$$

Пользуясь условиями ортонормировки для полиномов Лежандра,

$$\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'},$$

находим

$$\sigma_e = \frac{1}{4k^2} 2\pi \sum_l (2l+1)^2 |1 - S_l|^2 \frac{2}{2l+1} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) |1 - S_l|^2.$$

## 14.2 Упругие и неупругие каналы. Фазы рассеяния

Частица, налетающая на некоторую другую частицу (примеры: электрон и атом, нейтрон и ядро атома), может рассеяться упруго (сохранив свою энергию в системе центра масс), но может также инициировать неупругое взаимодействие. Неупругим процессом является, например, рассеяние с потерей энергии, точнее, с переходом части «кинетической» энергии падающей частицы во внутреннюю энергию одной или обеих сталкивающихся частиц (например, электрон, неупруго рассеивающийся на атоме, может передать часть своей энергии движению в энергию возбуждения атома). Неупругими также являются процессы (реакции), в которых сталкиваются одни частицы, а разлетаются другие (например, нейтрон захватывается ядром и испускается  $\gamma$ -квант).

В случае, когда имеет место только упругое взаимодействие, волновая функция

$$\psi(\mathbf{r})|_{r>a} = \sum_l \frac{2l+1}{2} i^l \left( h_l^{(-)}(kr) + S_l h_l^{(+)}(kr) \right) P_l(\cos \theta),$$

полностью описывает всё, что происходит вне области действия потенциала. Если же наряду с упругим рассеянием происходят и неупругие процессы, то выписанная волновая функция описывает систему только в упругом канале (и, конечно, только в области  $r > a$ ). Строго говоря, для полного описания всех процессов нужно искать волновые функции, описывающие взаимодействующие частицы в неупругих каналах. Однако, как мы покажем в этой лекции, для определения полного сечения неупругого взаимодействия достаточно знать только волновую функцию системы в упругом канале.

Легко видеть, что волновая функция, описывающая упругий канал, может быть представлена в виде суперпозиции двух волн, одна из которых является асимптотически сходящейся, а другая – асимптотически расходящейся. В самом деле, имеем

$$\psi(\mathbf{r})|_{r>a} = \psi^{(-)}(\mathbf{r}) + \psi^{(+)}(\mathbf{r}),$$

где

$$\begin{aligned}\psi^{(-)}(\mathbf{r}) &= \sum_l \frac{2l+1}{2} i^l h_l^{(-)}(kr) P_l(\cos \theta), \\ \psi^{(+)}(\mathbf{r}) &= \sum_l \frac{2l+1}{2} i^l S_l h_l^{(+)}(kr) P_l(\cos \theta).\end{aligned}$$

Учитывая асимптотическое поведение функций Ганкеля при  $r \rightarrow \infty$ ,

$$h_l^{(-)}(kr) \rightarrow i^{l+1} \frac{e^{-ikr}}{kr}, \quad h_l^{(+)}(kr) \rightarrow (-i)^{l+1} \frac{e^{ikr}}{kr},$$

получим

$$\begin{aligned}\psi^{(-)}(\mathbf{r}) &\rightarrow \frac{i}{2k} \left( \sum_l (-1)^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \right) \frac{e^{-ikr}}{r}, \\ \psi^{(+)}(\mathbf{r}) &\rightarrow -\frac{i}{2kr} \left( \sum_l (2l+1) S_l P_l(\cos \theta) \right) \frac{e^{ikr}}{r}.\end{aligned}$$

Плотность радиального тока, связанного со сходящейся волной, в асимптотике имеет вид

$$\begin{aligned}j_r^{(-)} \Big|_{r \rightarrow \infty} &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^{(-)*} \frac{\partial \psi^{(-)}}{\partial r} - \text{к.с.} \right) = \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \frac{1}{4k^2} \left( \sum_l (-1)^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \right)^2 \left( \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} - \text{к.с.} \right).\end{aligned}$$

Оставляя только те слагаемые, которые убывают по закону  $1/r^2$ , находим

$$\begin{aligned}j_r^{(-)} \Big|_{r \rightarrow \infty} &= \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \frac{1}{4k^2} \left( \sum_l (-1)^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \right)^2 \left( -ik \frac{1}{r^2} - \left( ik \frac{1}{r^2} \right) \right) = \\ &= -\frac{\hbar k}{mr^2} \frac{1}{4k^2} \left( \sum_l (-1)^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \right)^2.\end{aligned}$$

Аналогично с той же точностью для плотности радиального тока, свя-

занного с расходящейся волной, имеем

$$\begin{aligned} j_r^{(+)} \Big|_{r \rightarrow \infty} &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^{(+)*} \frac{\partial \psi^{(+)}}{\partial r} - \text{к.с.} \right) = \\ &= \frac{\hbar k}{mr^2} \frac{1}{4k^2} \left| \sum_l (2l+1) S_l P_l(\cos \theta) \right|^2. \end{aligned}$$

Полное число частиц, уходящих в единицу времени к рассеивающему центру, определяется интегралом

$$\frac{dN^{(-)}}{dt} = \oint |j_r^{(-)}| r^2 d\Omega.$$

Пользуясь ранее выписанным условием ортонормировки для полиномов Лежандра, получим

$$\frac{dN^{(-)}}{dt} = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{4k^2} 2\pi \sum_l (2l+1)^2 \frac{2}{2l+1} = \frac{\hbar k}{m} \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1).$$

Аналогично для полного числа частиц, уходящих в единицу времени от рассеивающего центра, имеем

$$\frac{dN^{(+)}}{dt} = \oint |j_r^{(+)}| r^2 d\Omega,$$

так что

$$\frac{dN^{(+)}}{dt} = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{4k^2} 2\pi \sum_l (2l+1)^2 |S_l|^2 \frac{2}{2l+1} = \frac{\hbar k}{m} \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) |S_l|^2.$$

Если имеет место только упругое рассеяние, то

$$\frac{dN^{(-)}}{dt} = \frac{dN^{(+)}}{dt} \quad \Rightarrow \quad |S_l| = 1.$$

В этом случае удобно представить амплитуды  $S_l$  в виде

$$S_l = e^{2i\delta_l},$$

где  $\delta_l$  – это фаза рассеяния  $l$ -й парциальной волны. При этом получим

$$|1 - S_l|^2 = |1 - e^{2i\delta_l}|^2 = |e^{i\delta_l} (e^{-i\delta_l} - e^{i\delta_l})|^2 = 4 \sin^2 \delta_l,$$

так что полное сечение упругого рассеяния принимает вид

$$\sigma_e = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l.$$

На прошлой лекции было показано, что существенные вклады в эту сумму дают лишь те парциальные волны, для которых  $l \leq ka$ .

Особенно интересен случай медленных частиц, когда  $ka \ll 1$ . При этом эффективно идет только  $s$ -рассеяние ( $l = 0$ ), и сечение рассеяния принимает вид

$$\sigma_e = \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0.$$

Если

$$\delta_0 = \frac{\pi}{2},$$

то сечение упругого рассеяния значительно превосходит геометрическое поперечное сечение

$$\sigma_0^{max} = \frac{4\pi}{k^2} \gg \pi a^2.$$

Этот случай называют резонансным рассеянием.

### 14.3 Полное сечение неупругого взаимодействия

Если частицы захватываются рассеивающим центром или так взаимодействуют с ним, что энергия рассеянных частиц увеличивается или уменьшается по сравнению с энергией падающих частиц, то говорят о наличии каналов неупругого взаимодействия. Полное сечение неупругого взаимодействия определяется формулой

$$\sigma_{ie} = \frac{dN_{ie}/dt}{j_{пад}},$$

где

$$\frac{dN_{ie}}{dt} = \frac{dN^{(-)}}{dt} - \frac{dN^{(+)}}{dt} = \frac{\hbar k}{m} \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1)(1 - |S_l|^2)$$

есть число частиц, покидающих упругий канал в единицу времени, а  $j_{пад} = \hbar k/m$  есть плотность потока падающих частиц. Соответственно полное сечение неупругого взаимодействия определяется исключительно амплитудами  $S_l$ , входящими в волновую функцию упругого канала, и имеет следующий вид:

$$\sigma_{ie} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1)(1 - |S_l|^2).$$



## 14.4 Полное сечение взаимодействия. Оптическая теорема

Полное сечение взаимодействия равно сумме полных сечений упругого и неупругого взаимодействий,

$$\begin{aligned}\sigma_t &= \sigma_e + \sigma_{ie} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (|1 - S_l|^2 + 1 - |S_l|^2) = \\ &= \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 - 2\operatorname{Re} S_l + |S_l|^2 + 1 - |S_l|^2) = \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 - \operatorname{Re} S_l).\end{aligned}$$

Заметим, что амплитуда упругого рассеяния на угол  $\theta = 0$  имеет вид

$$f(0) = \frac{i}{2k} \sum_l (2l+1) (1 - S_l).$$

Легко видеть, что

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{1}{2k} \sum_l (2l+1) (1 - \operatorname{Re} S_l).$$

Поэтому полное сечение взаимодействия выражается через амплитуду упругого рассеяния на угол 0 следующим образом:

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0).$$

Этот результат называется оптической теоремой.