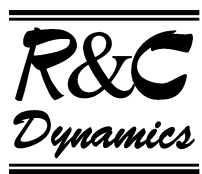


Энрико Ферми

**ЛЕКЦИИ
ПО
КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ**







NOTES ON QUANTUM MECHANICS

**A Cours Given by
ENRICO FERMI**

at the University of Chicago

The University of Chicago Press

Энрико Ферми

ЛЕКЦИИ
ПО
КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ

Издание второе

Перевод с английского
под редакцией
Н. В. Мицкевича

Научно-издательский центр
“Регулярная и хаотическая динамика”

Ижевск

2000

Ф 434 **Ферми Э.**

Лекции по квантовой механике. — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». 2000. — 248 с.

Предлагаемая книга является конспектом лекций, прочитанных знаменитым итальянским физиком Энрико Ферми студентам Чикагского университета. Этот курс представляет собой предельно краткое изложение всей квантовой механики (включая теорию электрона Дирака), причем содержащего основные математические выкладки полностью.

Блестящая научная индивидуальность Ферми проявляется и в общей структуре курса, и в нетривиальном изложении отдельных разделов математической физики, например, теории гильбертова пространства.

Книга предназначена для студентов, аспирантов и полезна для научных сотрудников и преподавателей.

Содержание

Предисловие к американскому изданию	7
Лекция 1. Аналогия между оптикой и механикой	9
Лекция 2. Уравнение Шредингера	14
Лекция 3. Простейшие одномерные задачи	19
Лекция 4. Линейный осциллятор	23
Лекция 5. Метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна	27
Лекция 6. Сферические функции	31
Лекция 7. Случай центральных сил	34
Лекция 8. Атом водорода	37
Лекция 9. Ортогональность волновых функций	45
Лекция 10. Линейные операторы	49
Лекция 11. Собственные функции и собственные значения	54
Лекция 12. Операторы материальной точки	61
Лекция 13. Принцип неопределенности	68
Лекция 14. Матрицы	71
Лекция 15. Эрмитовы матрицы. Задача на собственные значения	82
Лекция 16. Унитарные матрицы и преобразования	88
Лекция 17. Наблюдаемые	97
Лекция 18. Момент импульса	104
Лекция 19. Зависимость наблюдаемых от времени. Гейзенберговское представление	108

Лекция 20. Законы сохранения и сохраняющиеся величины	112
Лекция 21. Стационарная теория возмущений. Метод Ритца	120
Лекция 22. Случай вырождения и квазивырождения. Эффект Штарка на водороде	130
Лекция 23. Нестационарная теория возмущений. Борновское приближение	134
Лекция 24. Испускание и поглощение излучения	140
Лекция 25. Теория спина Паули	147
Лекция 26. Электрон в центральном поле	152
Лекция 27. Аномальный эффект Зеемана	162
Лекция 28. Сложение векторов момента	165
Лекция 29. Атомные мультиплеты	172
Лекция 30. Системы тождественных частиц	179
Лекция 31. Двухэлектронная система (атом гелия)	186
Лекция 32. Молекула водорода	190
Лекция 33. Теория столкновений	195
Лекция 34. Теория свободного электрона Дирака	199
Лекция 35. Электрон Дирака в электромагнитном поле	209
Лекция 36. Электрон Дирака в центральном поле. Водородоподобный атом	214
Лекция 37. Преобразование дираковских спиноров	218
Комментарии	228

Предисловие к американскому изданию

Энрико Ферми читал курсы лекции по квантовой механике неоднократно. Еще в то время, когда только стали появляться в журнале «Annalen der Physik» статьи Шредингера, Ферми разбирал их содержание со своими студентами на неофициальных семинарах; позднее он дал изложение нескольких статей Дирака в более привычной форме, отчасти в дидактических целях. С течением времени его трактовка теории и курсы становились все более систематическими; несомненно, должно существовать какое-то количество конспектов его лекций, составленных студентами Римского, Колумбийского и Чикагского университетов.

В начале 1954 г., менее чем за год до своей преждевременной кончины, Ферми снова прочел курс лекций по квантовой механике в Чикагском университете. Однако на этот раз он лично подготавливал конспекты для слушателей, размножая записи основных положений лекций на копировальном станке и раздавая их студентам перед каждой лекцией.

Следуя совету друзей и бывших учеников Ферми, мы решили выпустить эти конспекты в виде недорогого издания, с тем чтобы сделать их доступными более широкому кругу студентов, а не только тем, кому посчастливилось лично присутствовать на этих лекциях.

Мы надеемся, что молодые физики нового поколения, которые никогда не встречались с Ферми и для которых Ферми должен быть более чем просто именем среди других имен великих ученых нашего века, будут рады приобрести конспекты по столь важному предмету, как квантовая механика, сделанные для них собственной рукой такого мастера.

Обрисовав происхождение этих заметок, нет нужды объяснять, что их ни в какой мере нельзя рассматривать как окончательную трактовку квантовой механики, какую Ферми мог бы дать в более отточенном тексте. Гейзенберг, Паули, Дирак, де Бройль, Иордан, Крамерс — если упоминать лишь некоторых из создателей квантовой механики — все

они дали свои собственные варианты изложения этой теории в книгах, пользующихся заслуженной известностью. Предлагаемые заметки Ферми ни в каком отношении нельзя сравнивать с этими трудами. Дух, в котором они написаны, и цели, которые они преследовали, в корне отличны от духа и целей упомянутых книг.

Ферми в последние десять-пятнадцать лет жизни прочел едва ли одну-две книги по физике. Тем не менее он стоял на переднем крае науки, непосредственно получая информацию от исследователей и осмысливая ее по-своему. Практически с достоверностью известно, что при составлении этих конспектов он не прибегал к помощи учебников по квантовой механике, за исключением, быть может, очень немногих пунктов. Если все же отдельные места в этом конспекте окажутся очень близкими к тексту некоторых общепринятых учебников, мы должны заключить из этого, что, обдумывая предмет заново, Ферми самостоятельно пришел к этим традиционным формулировкам, содержащимся в его конспектах.

Мы повторяем, что эти конспекты были подготовлены только для лекций и что их распространение за пределами учебных групп не входило в намерения автора. Лишь зная его большой интерес к преподаванию, мы надеемся не погрешить против памяти Энрико Ферми, опубликовав эти заметки с пользой для других студентов.

Беркли, Калифорния
Январь 1960 г.

Э. Сегре

Лекция 1

Аналогия между оптикой и механикой

Между основными представлениями механики и оптики существует глубокая и нетривиальная аналогия. Это обстоятельство дает возможность составить следующий «словарь», позволяющий переводить утверждения механики на язык оптики и наоборот.

Словарь

<i>Механика</i>	<i>Оптика</i>
Материальная точка	Волновой пакет
Траектория	Луч
Скорость V	Групповая скорость V
Простой аналогии нет	Фазовая скорость v
Потенциальная энергия — функция координат: $U = U(\mathbf{x})$	Показатель преломления (или фазовая скорость v) как функция координат
Энергия E	Частота ν [в диспергирующей среде $v = v(\nu, x)$]

В оптике

$$E = E(\nu). \quad (1.1)$$

Разберем прежде всего следующее сопоставление:

Траектория $\swarrow$ из принципа Мопертюи	$=$ $\searrow$ из принципа Ферма	Луч
$\int \sqrt{E - U} ds = \min. \quad (1.2)$		$\int \frac{ds}{v} = \min. \quad (1.3)$

Доказательство принципа Мопертюи. Варьируя интеграл (1.2) (в предположении его экстремума):

$$\delta \int \sqrt{E - U} ds = \int \left\{ \sqrt{E - U} \delta ds - \frac{\delta U}{2\sqrt{E - U}} ds \right\} = 0,$$

пользуясь равенствами $\delta ds = \frac{d\mathbf{x}}{ds} \delta d\mathbf{x}$, $\delta U = \frac{\partial U}{\partial \mathbf{x}} \delta \mathbf{x}$, а затем проводя в первом слагаемом полученного таким образом равенства интегрирование по частям*, мы придем ввиду произвольности вариаций δx^i внутри области интегрирования к уравнению экстремали:

$$\frac{d}{ds} \left[\sqrt{E - U} \frac{d\mathbf{x}}{ds} \right] = - \frac{1}{2\sqrt{E - U}} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{x}}.$$

Используя равенства

$$V = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E - U}, \quad dt = \frac{ds}{V} = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{ds}{\sqrt{E - U}},$$

получим окончательно:

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{x}}.$$

Отсюда следует справедливость принципа (1.2), так как из него вытекают правильные уравнения движения.

Доказательство принципа Ферма. Заметим сначала, что очевидно следующее соответствие:

$$\int \frac{ds}{v} = \min \quad \rightarrow \quad \nu \int \frac{ds}{v} = \min \quad \rightarrow \quad \int \frac{ds}{\lambda} = \min.$$

Самое правое из этих равенств констатирует минимальность числа длин волн, укладывающихся на протяжении луча. Таким образом, определяемое принципом Ферма направление соответствует положительной интерференции (главному максимуму), т.е. действительному направлению распространения света. Тем самым подтверждена вся серия равенств, включая самое левое — собственно принцип Ферма.

Из сопоставления принципов (1.2) и (1.3) следует, что

$$\text{Траектория} \equiv \text{Луч},$$

если выполняется соотношение

$$\frac{1}{v(\nu, x)} = f(\nu) \sqrt{E(\nu) - U(x)}, \quad (1.4)$$

где $f(\nu)$ и $E(\nu)$ — произвольные пока функции частоты.

Вид функций $f(\nu)$ и $E(\nu)$ определим из условия, что скорость материальной точки

$$V = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E - U}$$

эквивалентна групповой скорости волнового пакета:

$$V = \left[\frac{d}{d\nu} \left(\frac{\nu}{v} \right) \right]^{-1}.$$

Вывод формулы для групповой скорости¹. Волновой пакет, гармоники которого укладываются в малом интервале частот, можно представить как

$$\sum_{\nu} a_{\nu} \cos 2\pi\nu \left(t - \frac{x}{v(\nu)} \right).$$

Если все $a_{\nu} > 0$, то в точке $x = 0$ и $t = 0$ должна иметь место положительная интерференция всех гармоник (главный максимум). Найдем теперь положение волнового пакета при любом $t \neq 0$, имея в виду, что оно всегда определяется координатой его максимума. Для максимума пакета справедливо равенство

$$\frac{d}{d\nu} \left\{ \nu \left(t - \frac{x}{v(\nu)} \right) \right\} = 0,$$

из которого следует, что $t = x \frac{d}{d\nu} \left(\frac{\nu}{v} \right)$. В духе нашей оптикомеханической аналогии эта связь между x и t эквивалентна равенству $t = x/V$. Сравнение двух последних выражений дает формулу для групповой скорости

$$\frac{1}{V} = \frac{d}{d\nu} \left(\frac{\nu}{v(\nu)} \right). \quad (1.5)$$

Вернемся теперь к условию эквивалентности скорости материальной точки и групповой скорости волнового пакета. Его можно записать в виде

$$\frac{d}{d\nu} \left(\frac{\nu}{v(\nu)} \right) = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\sqrt{E(\nu) - U(x)}}. \quad (1.6)$$

¹Подробнее о групповой скорости см., например, курс Д. И. Блохинцева, *Основы квантовой механики*, М., 1962, стр. 35. — *Прим. ред.*

Отсюда, используя условие (1.4), получаем:

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\sqrt{E-U}} &= \frac{d}{d\nu} \{ \nu f(\nu) \sqrt{E-U} \} = \\ &= \frac{d(\nu f(\nu))}{d\nu} \sqrt{E-U} + \frac{\nu f(\nu)}{2\sqrt{E-U}} \frac{dE}{d\nu}.\end{aligned}\quad (1.6a)$$

Рассмотрим полученный результат. Функция $U(x)$ изменяется от точки к точке независимо от ν ; следовательно, величину $\sqrt{E-U}$ также можно рассматривать как независимую переменную. Сравнивая коэффициенты при одинаковых степенях $\sqrt{E-U}$ в уравнении (1.6a), находим условия

$$\frac{d}{d\nu}(\nu f(\nu)) = 0, \quad \sqrt{\frac{m}{2}} = \frac{\nu f(\nu)}{2} \frac{dE}{d\nu}.$$

Первое из них дает $\nu f(\nu) = \text{const}$; тогда $\sqrt{\frac{m}{2}} = \frac{\nu f(\nu)}{2} \frac{dE}{d\nu} = \text{const}$, следовательно, $dE/d\nu = \text{const}$.

Введем обозначение $\frac{dE}{d\nu} = \text{const} = h$; тогда $E = h\nu + \text{const}$. Положим здесь $\text{const} = 0$, выбрав подходящим образом начало отсчета энергии. В результате имеем следующие формулы:

$$E = h\nu, \quad (1.7)$$

$$f(\nu) = 2m/h\nu, \quad (1.8)$$

$$v = \frac{h\nu}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{h\nu - U}}. \quad (1.9)$$

Фазовая скорость (1.9) определяет во всех точках значения показателя преломления и дисперсию.

Перейдем теперь к циклической частоте и введем обозначения

$$\omega = 2\pi\nu, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad \lambda = \frac{\lambda}{2\pi}. \quad (1.10)$$

Окончательный результат.

$$E = \hbar\omega, \quad v = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega - U}}, \quad V = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{\hbar\omega - U}.$$

$$\text{Далее } \lambda = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{v}{\omega} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega - U}} = \frac{\hbar}{mV} = \frac{\hbar}{p}. \quad (1.11)$$

Величину λ называют *дебройлевской длиной волны*. Исследование явления дифракции материальных частиц позволяет определить λ , а следовательно, h и $\hbar$. Приведем их численные значения:

$$\begin{aligned}h &= 6,6252(5) \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек} \quad [L^2 MT^{-1}], \\ \hbar &= 1,05444(9) \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек} \quad [L^2 MT^{-1}].\end{aligned}$$

Константа h (или $\hbar$) называется *постоянной Планка*.

Лекция 2

Уравнение Шредингера

Получим основное уравнение квантовой механики — уравнение Шредингера. Выражение для фазовой скорости волны было найдено в предыдущей лекции:

$$v = v(\omega, p) = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega - U}}. \quad (2.1)$$

Такая монохроматическая волна удовлетворяет уравнению

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0, \quad (a)$$

частное решение которого имеет вид

$$\psi = ue^{-i\omega t} = ue^{-\frac{i}{\hbar}Et}; \quad (2.2)$$

здесь по смыслу монохроматичности необходимо брать постоянную частоту ω .

Функция ψ представляет собой произведение двух функций: u , зависящей от пространственных координат, и экспоненты, зависящей только от времени. Подставив решение (2.2) в волновое уравнение (a), получим:

$$\nabla^2 u + \frac{\omega^2}{v^2} u = 0,$$

или с учетом (2.1):

$$\nabla^2 u + \frac{2m}{\hbar^2} (\hbar\omega - U) u = 0.$$

Заменяя ωu с помощью соответствия

$$\omega u \rightarrow -\frac{1}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

мы приходим к зависящему от времени уравнению Шредингера,

$$\nabla^2 \psi + i \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{2m}{\hbar^2} U \psi = 0. \quad (2.3)$$

Перепишем его несколько иначе:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi. \quad (2.4)$$

Заметим, что ψ — комплексная функция*.

В случае решения (2.2) мы имеем уравнение для стационарных состояний

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi. \quad (2.5)$$

Это уравнение имеет смысл только для состояний с фиксированной энергией** $E = \hbar\omega$.

Уравнение непрерывности. Уравнению (2.4) можно сопоставить соответствующее уравнение непрерывности. Для этого запишем уравнение, комплексно сопряженное (2.4):

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + U\psi^*. \quad (2.6)$$

Умножим (2.4) на ψ^* , а (2.6) — на ψ и вычтем из первого второе:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right\} = 0. \quad (2.7)$$

Представляется естественным дать следующее истолкование фигурирующим в уравнении (2.7) величинам***:

$$\psi^* \psi = |\psi|^2 = \text{Плотность вероятности}, \quad (2.8)$$

$$\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \text{Плотность потока вероятности}. \quad (2.9)$$

Нормировка. С точки зрения интерпретации величины (2.8) функцию ψ следует определить так, чтобы

$$\int |\psi|^2 d\tau = \int \psi^* \psi d\tau = 1. \quad (2.10)$$

Это в свою очередь приводит к следующим условиям:

- а) вблизи сингулярной точки ψ возрастает медленнее, чем $r^{-3/2}$;
- б) на бесконечности ψ стремится к нулю быстрее, чем $r^{-3/2}$. Исключения из правила «б» будут рассмотрены позднее.

Обобщения. Рассмотрим ряд специальных случаев уравнения Шредингера.

Точка на линии (одномерная задача):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x)\psi,$$

или в стационарном случае [уравнение (2.5)]

$$Eu = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + Uu.$$

(2.11)

Вращение вокруг неподвижной оси (A — момент инерции):

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\alpha, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2A} \frac{\partial^2 \psi(\alpha, t)}{\partial \alpha^2} + U(\alpha) \psi(\alpha, t),$$

или (стационарный случай)

$$Eu(\alpha) = -\frac{\hbar^2}{2A} \frac{d^2 u(\alpha)}{d\alpha^2} + U(\alpha) u(\alpha).$$

(2.12)

Точка на сфере (или «гантели») с фиксированным центром тяжести:

$$\Lambda \psi(\varphi, \theta, t) = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial \psi(\varphi, \theta, t)}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi(\varphi, \theta, t)}{\partial \varphi^2}, \quad (2.13)$$

где Λ — угловая часть лапласиана в сферических координатах*. Получаем:

$$\Lambda \psi(\varphi, \theta, t) - \frac{2A}{\hbar^2} U(\theta, \varphi) \psi(\varphi, \theta, t) = -i \frac{2A}{\hbar} \frac{\partial \psi(\varphi, \theta, t)}{\partial t},$$

или (стационарный случай)

$$\Lambda u(\varphi, \theta) + \frac{2A}{\hbar^2} (E - U) u(\varphi, \theta) = 0.$$

(2.14)

Здесь A — момент инерции (в случае точки $A = mr^2$).

Система n материальных точек. Волновая функция берется в виде $\psi = \psi(t; x_1, y_1, z_1; \dots; x_n, y_n, z_n)$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{1}{m_j} \nabla_j^2 \psi + U\psi,$$

или (стационарный случай)

$$Eu = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{1}{m_j} \nabla_j^2 u + Uu.$$

(2.15)

Общий случай динамической системы. Для такой системы кинетическая энергия (в обобщенных координатах) записывается в виде

$$T = \frac{1}{2} m_{ik} \dot{q}_i \dot{q}_k \quad (2.16)$$

(по одинаковым индексам подразумевается суммирование). Определим матрицу m^{ik} , обратную матрице m_{ik} , следующим образом:

$$m^{ik} m_{il} = \delta_{kl},$$

где $\delta_{kl} = 1$ при $k = l$ и $\delta_{kl} = 0$ при $k \neq l$. Как известно,

$$m^{il} = \frac{\text{adj}(m_{il})}{\det[m_{jk}]},$$

где в числителе стоит алгебраическое дополнение элемента m_{il} , а в знаменателе — детерминант матрицы m_{jk} . В дальнейшем обозначим

$$\det[m_{jk}] = \mathcal{D}. \quad (2.17)$$

В таких обозначениях $\nabla^2 \psi$ запишется как

$$\nabla^2 \psi(q_1, \dots, q_n, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{D}}} \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\sqrt{\mathcal{D}} \cdot m^{kl} \frac{\partial \psi(q_1, \dots, q_n, t)}{\partial q_l} \right], \quad (2.18)$$

а элемент объема — как

$$d\tau = \sqrt{\mathcal{D}} dq_1 dq_2 \dots dq_n. \quad (2.19)$$

Уравнение Шредингера в этом случае принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q_1, \dots, q_n, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \psi(q_1, \dots, q_n, t) + U\psi(q_1, \dots, q_n, t), \quad (2.20)$$

или (стационарный случай)

$$Eu(q_1, \dots, q_n) = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 u(q_1, \dots, q_n) + Uu(q_1, \dots, q_n).$$

ЛЕКЦИЯ 3

Простейшие одномерные задачи

Рассмотрим несколько частных случаев применения уравнения Шредингера, не зависящего от времени,

$$u'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)u = 0. \quad (3.1)$$

*а. Замкнутая линия*¹. Обозначим ее длину через a ; пусть потенциальная энергия $U(x) = 0$. Частные решения (3.1) суть

$$u(x) \sim e^{\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x}. \quad (3.2)$$

Условие периодичности требует, чтобы функция u имела вид

$$u \sim e^{i \frac{2\pi}{a} l x},$$

где l принимает любые целочисленные значения (положительные, отрицательные и нуль). Сравнивая это выражение с решением (3.2), легко определить E :

$$E_l = \frac{2\pi^2 \hbar^2 l^2}{ma^2}. \quad (3.3)$$

Мы пришли к важному заключению. Значения энергии оказываются квантованными уже в этом простейшем случае! Нормированные функции имеют при этом вид

$$u_l(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i \frac{2\pi}{a} l x}. \quad (3.4)$$

¹Такую линию можно рассматривать как отрезок прямой, введя топологическое условие, заключающееся в том, что его начало и конец совпадают друг с другом, откуда следует условие периодичности. — *Прим. ред.*

б. Вращение вокруг фиксированной оси. Чтобы перейти к этому случаю, достаточно в предыдущем решении произвести замену

$$m \rightarrow A \text{ (момент инерции)}, \quad a \rightarrow 2\pi, \quad x \rightarrow \alpha;$$

тогда формулы (3.3) и (3.4) примут вид

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2A} l^2, \quad u_l(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\alpha}. \quad (3.5)$$

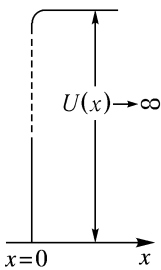


Рис. 1

в. Потенциальный барьер бесконечной высоты. [Граничное условие вида $U(x) = 0$ при $x \leq 0$ и $U(x) = \infty$ при $x > 0$ (рис. 1)] Чтобы найти решение при $x > 0$, мы сначала положим, что потенциальная энергия конечна и равна $U(x) \gg E$ при $x > 0$. Получим:

$$u \sim e^{-\sqrt{\frac{2mU}{\hbar^2}} x}, \quad (3.6a)$$

(решение с положительным знаком показателя экспоненты мы отбросили, так как при $x \rightarrow +\infty$ оно расходится быстрее, чем это допустимо). Теперь устремим U в точке $x = 0$ к бесконечности. На границе барьера ($x = 0$)

$$\frac{u'}{u} = -\sqrt{\frac{2mU}{\hbar^2}} \rightarrow -\infty. \quad (3.6b)$$

Отсюда ясно, что на границе ($x = 0$) следует принять

$$u = 0, \quad u' = \text{конечная величина}. \quad (3.6b)$$

г. Потенциальная яма с бесконечно высокими стенками (движение в сегменте $[0, a]$). Потенциальная энергия $U(x) = 0$ внутри сегмента и становится бесконечно большой на его концах. Следовательно, граничные условия для функции $u(x)$ имеют вид $u(0) = u(a) = 0$. Общее решение уравнения

$$u''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} u(x) = 0$$

в этом случае можно представить как $u(x) \sim \begin{pmatrix} \sin \\ \cos \end{pmatrix} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$.

Граничное условие $u(0) = 0$ исключает решение с косинусом; таким образом, в нашем случае остается

$$u(x) \sim \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x.$$

Граничное условие $u(a) = 0$ дает:

$$\sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = 0, \quad \text{т. е.} \quad \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = \pi n,$$

где n — любое положительное целое число. Следовательно,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m} n^2, \quad u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}. \quad (3.6)$$

Здесь $\sqrt{2/a}$ — нормировочный множитель.*

д. Точка на бесконечной линии [$U(x) \equiv 0$]

$$u''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} u(x) = 0. \quad (3.7)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$u(x) \sim e^{\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x}. \quad (3.8)$$

Это решение ни при каком знаке в экспоненте не может быть обычным образом нормировано! Существуют две возможности обойти это затруднение:

1. Рассмотреть решение (3.9) как предельный случай задачи «а»:

$$\left. \begin{aligned} u_l(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} e^{\frac{2\pi i l}{a} x}, \\ E_l &= \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \frac{l^2}{a^2} \end{aligned} \right\} \quad \text{при } a \rightarrow \infty.$$

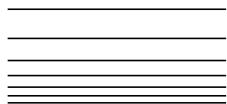


Рис. 2. Энергетические уровни (для квазинепрерывного случая)

Энергетические уровни при этом квазинепрерывны. Действительно (рис. 2), число уровней в интервале dE можно найти следующим образом: расстояние (интервал энергий) между двумя

соседними уровнями составляет

$$\frac{dE}{dl} = \frac{4\pi^2\hbar^2 l}{a^2 m} = \frac{2\pi\hbar}{a} \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E},$$

так что число уровней в интервале dE равно

$$\frac{2}{dE/dl} dE = \frac{a}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{dE}{\sqrt{E}}$$

(множитель 2 вводится для учета того, что l может принимать как положительные, так и отрицательные значения). В предельном случае $a \rightarrow \infty$ мы имеем непрерывный спектр, допускающий все значения $E \geq 0$.

ЗАМЕЧАНИЕ. К этому же результату приводит предельный переход $a \rightarrow \infty$ в случае «2».



Рис. 3. «Волновой пакет» для функции $u_{\delta k}$

2. Альтернативная возможность: пусть резких дискретных энергетических уровней нет, но *вместо них имеются* «размазанные» уровни, соответствующие «размазыванию» волновой функции $u(x)$ по интервалу δk вокруг точки $k = k_0$, т.е. функция u представляется в форме «волнового пакета» (рис. 3):

$$u_{\delta k}(x) = \int_{k_0 - \frac{\delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\delta k}{2}} e^{ikx} dk = \frac{1}{ix} e^{ikx} \Big|_{k_0 - \frac{\delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\delta k}{2}} = \frac{2}{x} \sin \frac{x\delta k}{2} e^{ik_0 x}.$$

Такое решение уже может быть нормировано при *весьма малых* δk . Тогда оно соответствует *почти* определенным значениям энергии. Обсуждение этого вопроса будет продолжено при рассмотрении принципа неопределенности¹.

¹В конспекте соответствующей (13-й) лекции прямое обсуждение вопроса об энергии такого волнового пакета отсутствует. — *Прим. ред.*

ЛЕКЦИЯ 4

Линейный осциллятор

В ряде областей физики и особенно в квантовой теории фундаментальную роль играет задача о линейном гармоническом осцилляторе. Классически такой осциллятор реализуется в системе, лишенной трения и подчиняющейся законам Ньютона, если в этой системе действует идеальная «возвращающая» упругая сила Гука ($F = -m\omega^2 x$).

Потенциальная энергия линейного осциллятора имеет вид

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (4.1)$$

и, следовательно, уравнение Шредингера записывается как

$$u''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) u(x) = 0. \quad (4.2)$$

Положим

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (4.3)$$

В этих обозначениях уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2) u(\xi) = 0. \quad (4.4)$$

Будем искать его решение в виде

$$u(\xi) = v(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad (4.5)$$

Подставляя решение (4.5) в уравнение (4.4), приходим к уравнению для функции $v(\xi)$:

$$\frac{d^2 v(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dv(\xi)}{d\xi} + (\varepsilon - 1) v(\xi) = 0; \quad (4.6)$$

решение его представим в виде ряда по степеням ξ :

$$v(\xi) = \sum_r a_r \xi^r. \quad (4.7)$$

Подстановка этого выражения в (4.6) дает рекуррентную формулу для коэффициентов a_r :

$$a_{r+2} = \frac{2r+1-\varepsilon}{(r+1)(r+2)} a_r, \quad (4.8)$$

откуда видно, что существуют два независимых решения, соответствующих четным и нечетным r . При $\xi \rightarrow \infty$ функция v ведет себя как $\exp \xi^2$, если только не выполнено условие

$$\varepsilon = 2n + 1, \quad (4.9)$$

где n — любое неотрицательное целое число. Случай экспоненциальной асимптотики недопустим с физической точки зрения¹; в случае же (4.9) решение уравнения (4.6) представимо в виде полиномов Эрмита как для четных, так и для нечетных r .

Полиномы Эрмита. Рассмотрим некоторые свойства полиномов Эрмита

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, & H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= -2 + 4\xi^2, & H_3(\xi) &= -12\xi + 8\xi^3, \dots \end{aligned} \quad (4.10)$$

Общее выражение для полинома Эрмита n -го порядка

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (4.11)$$

Убедимся в том, что это и есть общий случай решения уравнения (4.6). Подставив в него (4.11), получим:

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0, \quad (4.12)$$

что эквивалентно уравнению

$$\left[\frac{d^{n+2}}{d\xi^{n+2}} + 2\xi \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} + (2+2n) \frac{d^n}{d\xi^n} \right] e^{-\xi^2} = 0. \quad (4.13)$$

¹Такое решение (что совершенно неприемлемо) не поддается нормировке. — *Прим. ред.*

При $n = 0$ уравнение (4.13) удовлетворяется тождественно. Заметив теперь, что при дифференцировании по ξ тождество порядка $n - 1$ переходит в тождество порядка n , нетрудно применить метод индукции.

Приведем некоторые полезные свойства полиномов Эрмита.

$$\text{Рекуррентное свойство:} \quad \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi). \quad (4.14)$$

Доказательство.

Выражение (4.14) эквивалентно уравнению (4.13), если последнее записать для $n - 1$.

$$\text{Нормировка:} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n! \quad (4.15)$$

Доказательство проводится методом индукции. Для $n = 0$ справедливость (4.15) очевидна. Используя (4.11) и (4.14), получаем рекуррентную формулу

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 2n \int_{-\infty}^{+\infty} H_{n-1}^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi,$$

с помощью которой по индукции доказывается (4.15).

$$\text{Интегральное свойство:} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) e^{-x^2} e^{ipx} dx = i^n \sqrt{\pi} \cdot p^n \cdot e^{-\frac{p^2}{4}}. \quad (4.16)$$

Доказательство для $n = 0$ очевидно; для $n > 0$ оно проводится методом индукции с учетом (4.11).

Вывод. Нормированные собственные функции линейного осциллятора имеют вид

$$u_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \text{где } \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \quad (4.17)$$

Для значений энергии E получаем из (4.3) и (4.9):

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.18)$$

Отсюда вытекает важный результат: энергия квантового линейного гармонического осциллятора в принципе не может обращаться в нуль (конечно, при отличной от нуля собственной частоте ω), причем минимальная энергия, соответствующая основному состоянию, равна $\hbar\omega/2$ (в классической теории энергия основного состояния — состояния покоя — равна нулю). Возбуждение добавляет к энергии основного состояния величину, составляющую целое кратное величины $\hbar\omega$ (квантование энергии).

ЛЕКЦИЯ 5

Метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна

Метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна, называемый иначе квази-классическим приближением, служит для приближенного решения некоторых задач квантовой механики, позволяя определить первые члены разложения волновой функции по постоянной Планка. ВКБ-метод применим только в тех случаях, когда уравнение Шредингера допускает разделение переменных, так что его можно взять в форме

$$u''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] u(x) = 0. \quad (5.1)$$

Вводя обозначение

$$g(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] = \frac{m^2 V^2}{\hbar^2},$$

где V — классическая скорость, перепишем (5.1) в виде

$$u''(x) + g(x) u(x) = 0. \quad (5.2)$$

Первый случай, $g(x) > 0$. Используя подстановку

$$u(x) = e^{iy(x)}, \quad (5.3)$$

запишем на основании (5.2) уравнение для $y(x)$:

$$y'^2 - iy'' = g. \quad (5.4)$$

Если в качестве первой прикидки взять $y'(x) \approx \sqrt{g(x)}$, то будет иметь место соотношение

$$\frac{y''}{y'^2} = \frac{g'}{2g^{3/2}};$$

следовательно, это предположение о виде y' дает хорошую аппроксимацию решения уравнения (5.2) тогда, когда

$$|g'| \ll 2g^{3/2}. \quad (5.5)$$

Теперь положим:

$$y'(x) = \sqrt{g(x)} + \varepsilon(x), \quad (5.6)$$

где добавка $\varepsilon(x)$ — малая, медленно меняющаяся величина (поэтому членами ε^2 , ε' и ε'' можно будет пренебречь). Уравнение (5.4) при подстановке в него (5.6) принимает вид

$$g + 2\varepsilon\sqrt{g} - i\frac{g'}{2\sqrt{g}} = g,$$

откуда $\varepsilon = i(g'/4g)$; теперь интегрирование (5.6) дает:

$$y(x) \approx \int \left(\sqrt{g(x)} + i \frac{g'(x)}{4g(x)} \right) dx = \int \sqrt{g(x)} dx + \frac{i}{4} \ln g(x). \quad (5.7)$$

Переходя к исходной волновой функции $u(x)$, можно на основании (5.3) записать:

$$u(x) = e^{iy(x)} \approx \frac{1}{(g(x))^{1/4}} e^{i \int \sqrt{g(x)} dx}. \quad (5.8)$$

Таким образом, одно приближенное частное решение уравнения (5.2) найдено; другое его решение запишется как

$$u(x) = e^{-iy(x)} \approx \frac{1}{(g(x))^{1/4}} e^{-i \int \sqrt{g(x)} dx}. \quad (5.8a)$$

Очевидно, решением (приближенным) будет также вещественная линейная комбинация функций (5.8) и (5.8a):

$$u(x) \approx \frac{1}{(g(x))^{1/4}} \left\{ \sin \left[\int \sqrt{g(x)} dx + \text{const} \right] \right\}. \quad (5.9)$$

Это и есть искомое решение Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна ВКБ-решение).

ЗАМЕЧАНИЕ. Величина $|u|^2 \sim 1/\sqrt{g(x)} \sim 1/V$ пропорциональна времени, проводимому системой (в классическом смысле) в точке x .

Второй случай, $g(x) < 0$. Как и в случае $g(x) > 0$, находим здесь решение уравнения (5.2) в виде

$$u(x) \sim \frac{1}{(-g(x))^{1/4}} e^{\pm \int \sqrt{-g(x)} dx} \quad \text{для } g(x) < 0. \quad (5.10)$$

Рис. 4 иллюстрирует случаи $g(x) > 0$ и $g(x) < 0$: соответствующие решения u , а также поведение $U(x)$.

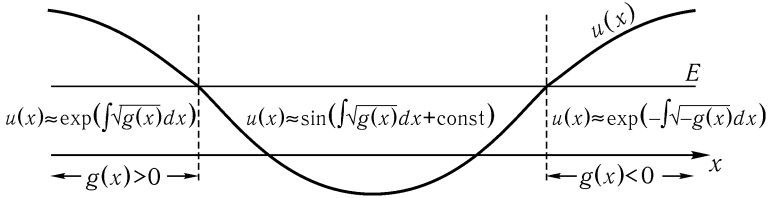


Рис. 4

Сопряжение решений. Остается «сшить» полученные решения в точках, где функция $g(x)$ меняет знак. Мы воспользуемся для этой цели следующей аналогией: уравнение

$$w''(x) + x w(x) = 0 \quad (5.11)$$

по виду напоминает уравнение (5.2) и имеет решение

$$w(x) = \sqrt{x} \left[C_1 J_{1/3} \left(\frac{2}{3} x^{2/3} \right) + C_2 N_{1/3} \left(\frac{2}{3} x^{2/3} \right) \right], \quad (5.12)$$

где $J(x)$ — функция Бесселя, а $N(x)$ — функция Неймана. Выбрав константы линейной комбинации (5.12) так, чтобы при $x \rightarrow -\infty$ решение стремилось к нулю, получим следующую асимптотику:

$$w(x) \begin{cases} \rightarrow \frac{1}{2(-x)^{1/4}} e^{-2/3 (-x)^{3/2}} & \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ \rightarrow \frac{1}{x^{1/4}} \sin \left(\frac{2}{3} x^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) & \text{при } x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (5.13)$$

Вывод. Сравнивая этот результат с ВКБ-решением (5.9) и (5.10), можно заметить, что эти решения аналогичны друг другу, если на концах интервала, в котором $g(x) > 0$, добавить фазу $\pi/4$. Этот прием позволяет приблизительно проследить поведение функции $u(x)$.

Обсуждение. Пусть $g(x) > 0$ между A и B и $g(x) < 0$ вне AB (рис. 5).

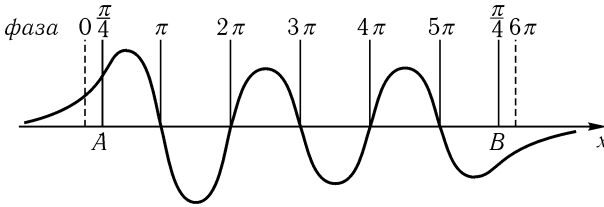


Рис. 5. К выводу условия квантования Бора–Зоммерфельда

Разность фаз между B и A равна

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi,$$

где n — число нулей волновой функции в интервале AB . Так как переменная часть фазы, согласно (5.9), равна $\int \sqrt{g(x)} dx$, условие сшивания решений на интервале AB (изменение фазы) имеет вид

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi = \int_A^B \sqrt{g(x)} dx = \int_A^B \frac{mV}{\hbar} dx = \frac{1}{2\hbar} \oint p dx,$$

где $p = mV$ — классический импульс.

Вывод. Мы пришли к условию квантования Бора–Зоммерфельда,

$$\oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (5.14)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. При движении вдоль замкнутого контура имеет место несколько иное условие квантования, а именно

$$\oint p dx = 2\pi\hbar n. \quad (5.15)$$

Для движения на полном сегменте, ограниченном в точках A и B бесконечно высокими потенциальными стенками, получим:

$$\oint p dx = 2\pi\hbar(n + 1), \quad (5.16)$$

где n равно числу нулей волновой функции *внутри* сегмента¹.

¹См. также: Д. И. Блохинцев, *Основы квантовой механики*, М., 1961, стр. 121; Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, М., 1963, стр. 195 и далее.

ЛЕКЦИЯ 6

Сферические функции

Сферические функции в квантовой механике используются, как правило, при решении уравнения Шредингера в случае центральных сил (см. лекцию 7).

Полиномы Лежандра. Эти полиномы, определяемые дифференциальной формулой

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l, \quad (6.1)$$

на отрезке $-1 \leq x \leq +1$ вводятся как решения уравнения Лежандра, к которому приводит ряд физических задач:

$$(1 - x^2) P_l'' - 2x P_l' + l(l + 1) P_l = 0. \quad (6.2)$$

Нормировка полиномов Лежандра определяется интегралом

$$\int_{-1}^{+1} P_l^2(x) dx = \frac{2}{2l + 1}. \quad (6.3)$$

Два свойства полиномов Лежандра.

1. Они образуют полную систему ортогональных функций:

$$\int_{-1}^{+1} P_l(x) P_{l'}(x) dx = 0 \quad \text{при} \quad l \neq l'. \quad (6.4)$$

2. Полином l -го порядка выражается через полиномы низших порядков рекуррентной формулой

$$P_l = \frac{2l - 1}{l} x P_{l-1} - \frac{l - 1}{2} P_{l-2}. \quad (6.5)$$

С помощью (6.1) вычислим некоторые полиномы:

$$\begin{aligned} P_0 &= 1, & P_1 &= x, & P_2 &= \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, \\ P_3 &= \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x, & P_4 &= \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8}, \\ P_5 &= \frac{63}{8}x^5 - \frac{35}{4}x^3 + \frac{15}{8}x, & P_l(1) &= 1. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Альтернативное определение:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2rx+r^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) r^l. \quad (6.7)$$

Здесь слева стоит производящая функция, а справа — ее разложение по степеням переменной r ($0 < r < 1$), причем роль коэффициентов разложения играют полиномы Лежандра.

Сферические (шаровые) функции. С помощью полиномов Лежандра строятся *сферические*, или *шаровые*, *функции* (сферические гармоники), определяемые как

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{N_{lm}} e^{im\varphi} \sin^{|m|} \theta \frac{d^{|m|} P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^{|m|}}, \\ \frac{1}{N_{lm}} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}, \end{aligned} \quad (6.8)$$

для $m \leq 0$ берется знак «+», для $m > 0$ берется знак $(-1)^m$.

[Это правило можно записать короче так: нормирующая постоянная в (6.8) имеет знак $(-1)^{(m+|m|)/2}$.]

Нормировка и ортогональность сферических функций определяются равенством

$$\int_{4\pi} Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (6.9)$$

Дифференциальное уравнение для сферических функций получается из уравнения Лапласа при применении метода разделения переменных; оно имеет следующий вид:

$$\Delta Y_{lm} + l(l+1)Y_{lm} = 0, \quad (6.10)$$

где Λ — угловая часть оператора Лапласа,

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (6.11)$$

Некоторые свойства сферических функций:

$$\begin{aligned} \nabla^2 (r^l Y_{lm}) &= 0; \\ \nabla^2 (r^{-l-1} Y_{lm}) &= 0 \end{aligned} \quad (6.12)$$

везде, кроме начала координат ($r = 0$).

Полный лапласиан в сферических координатах (r, θ, φ) имеет вид

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda. \quad (6.13)$$

Разложение произвольной функции по шаровым функциям (сферическим гармоникам):

$$f(\theta, \varphi) = \sum C_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad C_{lm} = \int_{4\pi} f(\theta, \varphi) Y_{lm}^* d\omega. \quad (6.14)$$

Возможность такого разложения вытекает из свойств полноты и ортогональности системы сферических функций.

Явный вид некоторых сферических функций:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right),$$

$$Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \quad Y_{2,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi},$$

$$Y_{3,0} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \left(\frac{5}{2} \cos^2 \theta - \frac{3}{2} \cos \theta \right),$$

$$Y_{3,\pm 1} = \mp \frac{1}{4} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{3,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi}, \quad Y_{3,\pm 3} = \mp \frac{1}{4} \sqrt{\frac{35}{4\pi}} \sin^3 \theta \cdot e^{\pm 3i\varphi}.$$

ЛЕКЦИЯ 7

Случай центральных сил

Важную роль в теории атома играют центральные силы; потенциальная энергия в случае центральных сил зависит лишь от радиальной координаты (если источник поля совпадает с началом сферической системы координат). Волновое уравнение при этом имеет вид

$$\nabla^2 u(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] u(r) = 0. \quad (7.1)$$

Перепишем его в полярных (сферических) координатах:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda u + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] u = 0. \quad (7.2)$$

Здесь Λ — оператор, определяемый формулой (6.11).

Разложим $u(r, \theta, \varphi)$ по сферическим функциям:

$$u(r, \theta, \varphi) = \sum R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (7.3)$$

Суммирование охватывает все значения индексов n, l, m , но в конкретных случаях оно может сниматься, говоря формально, благодаря специальному выбору коэффициентов разложения, входящих в $R_{nl}(r)$. Подстановка этого разложения в уравнение (7.2) дает:

$$\sum Y_{lm} \frac{\partial^2 R_{nl}}{\partial r^2} + \sum \left\{ \frac{2}{r} Y_{lm} \frac{\partial R_{nl}}{\partial r} + \frac{R_{nl}}{r^2} \Lambda Y_{lm} \right\} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) u = 0.$$

Используя (6.10), приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \sum Y_{lm}(\theta, \varphi) \left\{ R''_{nl}(r) + \frac{2}{r} R'_{nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl} + \right. \\ \left. + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) R_{nl} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Умножая его на $Y_{lm}^* d\omega$ и интегрируя, получаем с учетом свойства (6.9):

$$R_{nl}'' + \frac{2}{r} R_{nl}' + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R_{nl} = 0. \quad (7.5)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. В этом уравнении уже не фигурирует число m .

В дальнейшем оно будет отождествлено с *магнитным квантовым числом*. Не следует смешивать его с массой, обозначаемой той же буквой, но появляющейся всегда в характерных комбинациях [см., например, уравнение (7.5)].

Важно, что каждому решению уравнения (7.5) соответствует $2l+1$ решений уравнения (7.1). Сделаем полезное преобразование

$$R_{nl}(r) = r v_{nl}(r); \quad (7.6)$$

уравнение (7.5) примет вид

$$v_{nl}''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} v_{nl}(r) = 0. \quad (7.7)$$

Каждому состоянию (т.е. определенному значению l) принято сопоставлять буквенное обозначение, именно

$$\begin{array}{ccccccc} l=0 & l=1 & l=2 & l=3 & l=4 & l=5 & l=6 \\ s & p & d & f & g & h & i \end{array}$$

Позднее будет показано, что величина $\hbar l$ равна моменту импульса M .¹

Уравнение для двух материальных точек в поле центральных сил. Это уравнение имеет вид

$$\frac{1}{m_1} \nabla_1^2 u + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 u + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(r)) u = 0, \quad (7.8)$$

где $u \equiv u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, а $r = |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|$. Сделаем замену координат

$$\begin{array}{l} \mathbf{x} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 \text{ — относительные координаты двух точек,} \\ \mathbf{X} = \frac{m_1 \mathbf{x}_1 + m_2 \mathbf{x}_2}{m_1 + m_2} \text{ — координаты центра масс.} \end{array} \quad (7.9)$$

¹Точнее, максимальному значению проекции момента на выделенную ось. — Прим. ред.

В новых координатах лапласиан распадается на два оператора:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad \nabla_g^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2},$$

причем

$$\frac{1}{m_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 = \frac{1}{m_1 + m_2} \nabla_g^2 + \frac{1}{m} \nabla^2, \quad (7.10)$$

где $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ — приведенная масса.

Уравнение (7.8) приобретает вид

$$\frac{1}{m_1 + m_2} \nabla_g^2 u + \frac{1}{m} \nabla^2 u + \frac{2}{\hbar^2} [E - U(r)] u = 0. \quad (7.11)$$

Будем искать его решение в форме¹

$$u(x, X) = \sum_{\mathbf{k}} w_{\mathbf{k}}(x) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{X}}. \quad (7.12)$$

Подставляя этот вид решения в (7.11) и производя обратное преобразование Фурье, получаем:

$$\nabla^2 w_{\mathbf{k}} + \frac{2m}{\hbar^2} [E_{red} - U(r)] w_{\mathbf{k}} = 0, \quad (7.13)$$

где

$$E_{red} = E - \frac{(\hbar k)^2}{2(m_1 + m_2)} \quad (7.14)$$

— приведенная энергия. Член $(\hbar k)^2 / 2(m_1 + m_2)$ представляет собой кинетическую энергию центра масс.

Вывод. Разделение координат на относительные и координаты

Лекция 8

Атом водорода

В задаче об атоме водорода естественно пренебречь движением ядра; тогда вместо приведенной массы можно взять массу электрона m .

Волновое уравнение. Кулоновская потенциальная энергия электрона в поле ядра имеет вид

$$U = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (8.1)$$

где $Z = 1$ для атома водорода*. Запишем в этом случае уравнение (7.7) для радиальной волновой функции:

$$v''(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) v(r) = 0. \quad (8.2)$$

Введем новые переменные

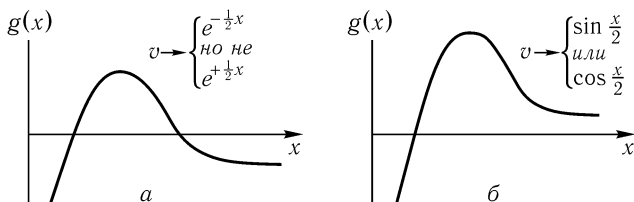
$$x = \frac{2r}{r_0}, \quad r_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}}, \quad A = \frac{Ze^2}{2r_0|E|} = \sqrt{\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2|E|}}. \quad (8.3)$$

Уравнение (8.2) тогда приводится к виду

$$\frac{d^2v}{dx^2} + \left(\pm \frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) v = 0, \quad (8.4)$$

где для $E > 0$ берется знак «+», а для $E < 0$ — знак «−». Выражение в скобках удобно обозначить как $g(x)$.

Графический анализ. Поведение $g(x)$ изображено на рис. 6. В случае $E < 0$ решение $v(x)$ имеет при $x \rightarrow \infty$ асимптотику вида $v(x) \rightarrow e^{\pm x/2}$. Ввиду требования конечности волновой функции при $x \rightarrow \infty$ мы должны отбросить решение $e^{+x/2}$; из этого дополнительного требования вытекает, что возможны только дискретные значения E .

Рис. 6. График функции $g(x)$

В случае $E > 0$ решение $v(x) \rightarrow \begin{bmatrix} \sin \\ \cos \end{bmatrix} (x/2)$ при $x \rightarrow \infty$, поэтому дополнительных условий не требуется и, следовательно, возможны любые значения $E > 0$.

Случай $E < 0$ (дискретные значения энергии). Уравнение (8.4) в этом случае имеет вид

$$\frac{d^2 v}{dx^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) v = 0. \quad (8.5)$$

Будем искать его решение в форме

$$v(x) = e^{-x/2} y(x), \quad (8.6)$$

где $y(x)$ — неизвестная пока функция, которую надлежит определить. Подставив (8.6) в уравнение (8.5), имеем:

$$y'' - y' + \left(\frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) y = 0. \quad (8.7)$$

Это уравнение имеет два решения, причем их асимптотика следующая:

$$y(x \rightarrow 0) = \begin{cases} x^{l+1} \\ \text{или} \\ x^{-l}. \end{cases}$$

Второму $[y(x) \rightarrow x^{-l} \text{ при } x \rightarrow 0]$ соответствует $u(x) \sim r^{-l-1}$. В этом случае нормировка расходится в начале координат при $l \geq 1$ и такое решение неприемлемо. Решения этого типа при $l = 0$ также должны

быть отброшены, ибо в этом случае $u(x) \sim 1/r$, т. е. содержит в начале координат сингулярность типа

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}).$$

(Потенциальная энергия *не имеет* такой сингулярности!)

Итак, берем $y(x \rightarrow 0) = x^{l+1}$. Решение уравнения (8.7) имеет вид

$$y(x) = x^{l+1} \sum_0^{\infty} a_s x^s. \quad (8.8)$$

После подстановки его в уравнение (8.7) получим рекуррентную формулу для коэффициентов разложения (8.8):

$$a_{s+1} = \frac{s+l+1-A}{(s+1)(s+2l+2)} a_s. \quad (8.9)$$

В общем случае (8.8) представляет собой бесконечный ряд, слишком быстро расходящийся на бесконечности: $y(x) \rightarrow e^x$, т. е. $u(x) \rightarrow e^{x/2}$ при $x \rightarrow \infty$. При этом функция $u(x)$ ненормируема ни при каких значениях A , кроме

$$A = n = n' + l + 1, \quad (8.10)$$

где n — целое число¹. В этом случае бесконечный ряд вырождается в полином. Из (8.10) и (8.3) находим:

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}, \quad n = l+1, l+2, \dots, \quad (8.11)$$

или в случае собственно водородного атома $Z = 1$

$$E_n = -R_{\infty} \left(\frac{1}{n^2} \right),$$

где

$$R_{\infty} = E_1 = 21,795 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} = 13,605 \text{ эв} = 109737,309(12) \text{ см}^{-1}.$$

¹ Величина n , обычно называемая *главным квантовым числом*, играет важную роль в классификации энергетических уровней атомов. — *Прим. ред.*

Решение волнового уравнения выражается через полиномы Лагерра.

Полиномы Лагерра. Полином k -го порядка задается общей дифференциальной формулой

$$L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x}). \quad (8.12)$$

Например,

$$\left. \begin{aligned} L_0(x) &= 1, & L_1(x) &= 1 - x, \\ L_2(x) &= 2 - 4x + x^2, \\ L_3(x) &= 6 - 18x + 9x^2 - x^3, \dots \end{aligned} \right| \quad (8.13)$$

Дифференциальное уравнение Лагерра. Обозначим $f(x) = x^k e^{-x}$; тогда (8.12) запишется как

$$L_k(x) = e^x f^{(k)}(x). \quad (8.12a)$$

Очевидно соотношение $x f'(x) = (k - x) f(x)$; дифференцируя его $k + 1$ раз, получаем уравнение

$$x f^{(k+2)}(x) + (x + 1) f^{(k+1)}(x) + (k + 1) f^{(k)}(x) = 0.$$

Но, согласно определению (8.12a), $f^{(k)}(x) = e^{-x} L_k(x)$; подстановка в наше уравнение дает:

$$x L_k''(x) + (1 - x) L_k'(x) + k L_k(x) = 0. \quad (8.14)$$

Это и есть *дифференциальное уравнение Лагерра*.

Нормировка. Производная j -го порядка от формы (8.12) равна

$$L_k^{(j)}(x) = \frac{d^j}{dx^j} \left\{ e^x \frac{d^k}{dx^k} x^k e^{-x} \right\}. \quad (8.15)$$

Дифференцируя j раз уравнение (8.14), получаем уравнение второго порядка для функции (8.15):

$$\begin{aligned} \frac{d^j}{dx^j} [x L_k''(x) + (1 - x) L_k'(x) + k L_k(x)] &= \\ = x L_k^{(j)''}(x) + (j + 1 - x) L_k^{(j)'}(x) + (k - j) L_k^{(j)}(x) &= 0. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Отсюда следует правило нормировки таких функций:

$$\int_0^{\infty} L_k^{(j)}(x) L_{k'}^{(j)}(x) x^j e^{-x} dx = \frac{(k!)^3}{(k-j)!} \delta_{kk'}. \quad (8.17)$$

Итак, решение радиального уравнения (7.7) найдено. Вернемся теперь к задаче об атоме водорода.

Нормированные собственные функции. Полученное решение выражается через шаровые функции и полиномы Лагерра. Частное решение имеет вид

$$u_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{a^3 n^4 [(n+1)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n+l}^{(2l+1)}\left(\frac{2r}{na}\right), \quad (8.18)$$

где

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{1}{Z}, \quad (8.19)$$

$$\frac{\hbar^2}{me^2} = \text{Боровский радиус} = 0,529171(6) \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

(массу ядра при этом считают бесконечно большой). Выпишем в явном виде несколько собственных функций:

$$u(1s) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad u(2s) = \frac{2 - \frac{r}{a}}{4\sqrt{2\pi a^3}} e^{-r/2a},$$

$$u(2p) = \frac{\frac{r}{a} e^{-r/2a}}{8\sqrt{\pi a^3}} \times \begin{cases} -\sin \theta \cdot e^{i\varphi}, \\ \sqrt{2} \cos \theta, \\ \sin \theta \cdot e^{-i\varphi}. \end{cases} \quad (8.20)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Функции s -волны (состояния с $l = 1$) — единственные, для которых $u(r=0) \neq 0$. Для них

$$u_{ns}(r=0) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3 n^3}}. \quad (8.21)$$

Полезно обсудить качественно спектр водорода и водородоподобных ядер (рис. 7) и характер вырождения энергетических уровней.

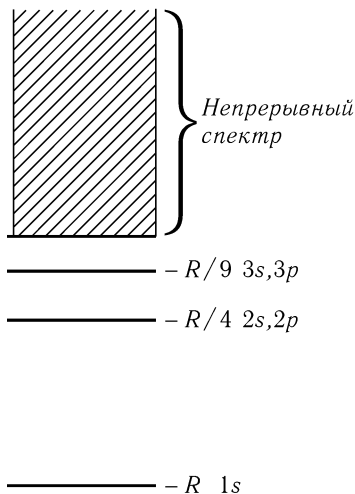


Рис. 7. Дискретный и непрерывный спектры атома водорода

Каждое состояние атома, характеризующееся определенными значениями энергии и момента, помечают индексами n, l . В общем случае каждому уровню с фиксированным главным квантовым числом n соответствует n состояний, различающихся квантовыми числами $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$. Такое *вырождение* характерно лишь для случая кулоновского поля.

Каждое состояние с определенным l вырождено $2l + 1$ раз, так как ему соответствуют различные значения магнитного квантового числа $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Таким образом, общая кратность вырождения стационарного состояния с данным квантовым числом n равна

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

Модифицированный кулоновский потенциал. Рассмотрим случай «модифицированного» кулоновского потенциала, имеющего вид

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left(1 + \frac{\beta}{r} \right). \quad (8.22)$$

Уравнение для радиальной волновой функции [$g(x) < 0$], соответствующее уравнению (8.5), при потенциале (8.22) имеет вид

$$v'' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{A}{x} + \frac{2A\beta}{r_0} \frac{1}{x^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] v = 0.$$

Если ввести обозначение

$$l'(l' + 1) = l(l + 1) - \frac{2A\beta}{r_0} = l(l + 1) - \frac{2\beta}{a},$$

то это уравнение перейдет прямо в (8.5) (но вместо целого числа l здесь фигурирует, вообще говоря, не целое число l'). Соответствующие соб-

ственные значения определяются величиной

$$A = n' + l' + 1 = n' + 1 + l - (l - l') = n - (l - l') = n - \alpha_l$$

(n' — целое). Формула (8.11) записывается при этом следующим образом:

$$E_{nl} = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 (n - \alpha_l)^2}. \quad (8.23)$$

Отсюда ясно, что отклонения формы поля от кулоновской, вообще говоря, снимают вырождение (в рассмотренном случае лишь частично, так как наряду с зависимостью от n появляется зависимость энергии от l , но не от m).

Область положительных энергий. Рассмотрим собственные функции водородного атома в области $E > 0$. Радиальное уравнение в этом случае имеет вид

$$R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R(r) = 0 \quad (8.24)$$

и имеет решения

$$R(r) = r^l e^{ikr} F(z), \quad \text{где} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad z = -2ikr. \quad (8.25)$$

Подстановка (8.25) в уравнение (8.24) дает уравнение для $F(z)$:

$$z \frac{d^2 F(z)}{dz^2} + (2l + 2 - z) \frac{dF(z)}{dz} - (l + 1 - i\alpha) F(z) = 0, \quad (8.26)$$

где использовано обозначение

$$\alpha = \frac{me^2 Z}{\hbar^2 k}. \quad (8.27)$$

Решения уравнения (8.26) суть гипергеометрические функции

$$F(r) = F(l + 1 - i\alpha, 2l + 2, -2ikr). \quad (8.28)$$

Определение и свойства их приведены на следующей странице.

Асимптотические выражения для R_l :

$$\begin{aligned}
 R_l(r \rightarrow 0) &= r^l, \\
 R_l(r \rightarrow \infty) &= \frac{e^{-\frac{\pi}{2}\alpha} (2l+1)!}{(2k)^l |\Gamma(l+1+i\alpha)|} \times \\
 &\times \frac{1}{kr} \sin \left\{ kr + \alpha \ln(2kr) - \frac{l\pi}{2} - \arg \Gamma \right\}.
 \end{aligned} \tag{8.29}$$

Для $l = 0$, например,

$$\begin{aligned}
 R_0(r \rightarrow 0) &= 1, \\
 R_0(r \rightarrow \infty) &= \frac{e^{-\frac{\pi}{2}\alpha}}{|\Gamma(l+i\alpha)|} \frac{1}{kr} \sin \{ kr + \alpha \ln(2kr) - \arg \Gamma \},
 \end{aligned} \tag{8.30}$$

где

$$\begin{aligned}
 \Gamma(n) &= (n-1)!, \\
 |\Gamma(1+i\alpha)|^2 &= \frac{2\pi\alpha}{e^{\pi\alpha} - e^{-\pi\alpha}}, \\
 \Gamma(1+z) \cdot \Gamma(1-z) &= \frac{\pi z}{\sin \pi z}.
 \end{aligned} \tag{8.31}$$

Гипергеометрические функции. Первые члены разложения гипергеометрической функции в степенной ряд имеют вид

$$F(a, b, z) = 1 + \frac{a}{b \cdot 1!} z + \frac{a(a+1)}{b(b+1) \cdot 2!} z^2 + \dots \tag{8.32}$$

Определение. В общем случае гипергеометрические функции по определению удовлетворяют уравнению вида

$$zF''(z) + (b-z)F'(z) - aF(z) = 0. \tag{8.33}$$

Асимптотика. Если b — целое число, а z — чисто мнимая величина, то асимптотика $F(z)$ записывается следующим образом:

$$F(z \rightarrow i\infty) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} z^{a-b} \cdot e^z. \tag{8.34}$$

ЛЕКЦИЯ 9

Ортогональность волновых функций

Проблема ортогональности волновых функций — решений волнового уравнения — в трехмерном и одномерном случаях имеет ряд особенностей; поэтому их целесообразно рассмотреть отдельно.

А. Одномерный случай. Волновые функции (без зависимости от времени) имеют вид $u_i = u_i(x)$. Произведем следующие очевидные операции:

$$\begin{array}{l|l} u_l'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E_l - U(x)]u_l = 0 & u_k \\ u_k'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E_k - U(x)]u_k = 0 & -u_l \end{array} \quad (9.1)$$

$$u_k u_l'' - u_l u_k'' = \frac{d}{dx}(u_k u_l' - u_l u_k') = \frac{2m}{\hbar^2}(E_k - E_l)u_k u_l.$$

Проинтегрируем обе части этого равенства на отрезке ab :

$$u_k u_l' \Big|_a^b - u_l u_k' \Big|_a^b = \frac{2m}{\hbar^2}(E_k - E_l) \int_a^b u_k u_l dx. \quad (9.2)$$

Обычно $u_k, u_l \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$. Устремляя пределы a и b в (9.2) к бесконечности, $a \rightarrow -\infty$, $b \rightarrow +\infty$, получаем:

$$0 = \frac{2m}{\hbar^2}(E_k - E_l) \int_{-\infty}^{+\infty} u_k u_l dx. \quad (9.3)$$

Обсудим другие типы граничных условий.

Периодическое движение [граничное условие вида $u(x) = u(x + \tau)$]:

$$0 = (E_k - E_l) \oint u_k u_l dx. \quad (9.4)$$

Движение в сегменте (бесконечно большой потенциал в точках a и b):

$$0 = (E_k - E_l) \int_a^b u_k u_l dx. \quad (9.5)$$

Общий случай. Очевидно, в общем случае можно записать

$$0 = (E_k - E_l) \int u_l u_k dx, \quad (9.6)$$

где интегрирование проводится по *всей* области определения решения. При $E_k \neq E_l$ из (9.6) следует, что

$$0 = \int u_k u_l dx. \quad (9.7)$$

Это означает, что два независимых решения волнового уравнения ($k \neq l$) *ортogonalны* друг другу, так как их скалярное произведение (9.7) обращается в нуль.

В одномерных задачах, как правило, каждому собственному значению энергии E_k соответствует одно решение (с точностью до постоянного множителя). Если собственные функции *нормированы*, то

$$\int u_k u_l dx = \delta_{kl}, \quad \delta_{kl} \equiv \begin{cases} 1 & \text{при } k = l, \\ 0 & \text{при } k \neq l. \end{cases} \quad (9.8)$$

В этом заключается свойство *ортонормированности* волновых функций.

Разложение произвольной функции. Всякую непрерывную функцию $f(x)$ можно разложить в ряд по собственным функциям системы. Разложение имеет вид

$$f(x) = \sum c_k u_k(x), \quad c_k = \int f(x) u_k(x) dx. \quad (9.9)$$

(Интегрирование проводится по всей области определения независимой переменной x .)

Б. Трехмерный случай. Собственные функции u_i в этом случае зависят, вообще говоря, от всех трех пространственных переменных. Аналогично предыдущему имеем:

$$\left. \begin{aligned} \nabla^2 u_l + \frac{2m}{\hbar^2} (E_l - U) u_l &= 0 \\ \nabla^2 u_k + \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - U) u_k &= 0 \end{aligned} \right| \begin{array}{l} u_k \\ -u_l \end{array} \quad (9.10)$$

$$\nabla(u_k \nabla u_l - u_l \nabla u_k) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_l) u_k u_l \quad (9.11)$$

Общий случай. Очевидно, в общем случае можно записать

$$0 = (E_k - E_l) \int u_l u_k dx, \quad (9.6)$$

где интегрирование проводится по *всей* области определения решения. При $E_k \neq E_l$ из (9.6) следует, что

$$0 = \int u_k u_l dx. \quad (9.7)$$

Это означает, что два независимых решения волнового уравнения ($k \neq l$) *ортogonalны* друг другу, так как их скалярное произведение (9.7) обращается в нуль.

В одномерных задачах, как правило, каждому собственному значению энергии E_k соответствует одно решение (с точностью до постоянного множителя). Если собственные функции *нормированы*, то

$$\int u_k u_l dx = \delta_{kl}, \quad \delta_{kl} \equiv \begin{cases} 1 & \text{при } k = l, \\ 0 & \text{при } k \neq l. \end{cases} \quad (9.8)$$

В этом заключается свойство *ортонормированности* волновых функций.

Разложение произвольной функции. Всякую непрерывную функцию $f(x)$ можно разложить в ряд по собственным функциям системы. Разложение имеет вид

$$f(x) = \sum c_k u_k(x), \quad c_k = \int f(x) u_k(x) dx. \quad (9.9)$$

(Интегрирование проводится по всей области определения независимой переменной x .)

Б. Трехмерный случай. Собственные функции u_i в этом случае зависят, вообще говоря, от всех трех пространственных переменных. Аналогично предыдущему имеем:

$$\left. \begin{aligned} \nabla^2 u_l + \frac{2m}{\hbar^2} (E_l - U) u_l &= 0 \\ \nabla^2 u_k + \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - U) u_k &= 0 \end{aligned} \right| \begin{array}{l} u_k \\ -u_l \end{array} \quad (9.10)$$

$$\nabla(u_k \nabla u_l - u_l \nabla u_k) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_l) u_k u_l \quad (9.11)$$

вида

$$u_2^{int} = u_2 - u_1 \int u_1 u_2 d\tau.$$

«Промежуточная» u_2^{int} ортогональна к функции u_1 ; действительно, благодаря единичной нормировке u_1

$$\int u_1 u_2^{int} d\tau = \int u_1 u_2 d\tau - \left(\int u_1^2 d\tau \right) \cdot \int u_1 u_2 d\tau = 0.$$

Используя теперь введенные функции

$$\begin{aligned} u_1^{new} &= \text{Нормированная } u_1, \\ u_2^{new} &= \text{Нормированная } u_2^{int}, \end{aligned}$$

получаем две функции, удовлетворяющие равенству (9.15) — свойству ортогональности.

Вывод. Даже в тех случаях, когда имеет место *вырождение*, возможно и удобно выбрать *такой функциональный базис*, в котором удовлетворяется требование ортогональности (9.15).

Укажем трехмерный аналог разложения (9.9):

$$f(x, y, z) = \sum c_k u_k(x, y, z), \quad c_k = \int u_k f d\tau. \quad (9.16)$$

*Важные моменты.**

- Полнота системы собственных функций.*
- Роль комплексных решений.*
- Решение зависящего от времени уравнения Шредингера.*

Решение волнового уравнения, не зависящего от времени (стационарные состояния), вообще говоря, следует умножить на экспоненту, являющуюся решением уравнения $\partial\psi/\partial t = -(i/\hbar)E\psi$. В общем случае состояние с неопределенной энергией (смесь состояний) описывается, как обычно, линейной комбинацией вида

$$\psi = \sum_k c_k e^{-(i/\hbar)E_k t} u_k(x, y, z). \quad (9.17)$$

г. Смысл $|c_k|^2$.

Лекция 10

Линейные операторы

1. *Функции задаются на многообразии.* Примерами многообразий могут служить числовая ось x (одномерное пространство), трехмерное пространство чисел x, y, z , точки на поверхности сферы, конечный набор точек и т. д.

2. *Функции можно интерпретировать как векторы в пространстве.* При этом пространство может иметь конечное или бесконечное число измерений (гильбертово пространство).

3. *Оператор.*

В общем случае оператор $\hat{O}$ определяет правило получения функции g из функции f :

$$g = \hat{O}f. \quad (10.1)$$

Операциям возведения в степень, возведения в степень с последующим умножением на число, однократного и многократного дифференцирования, умножения на некоторую функцию и т. д. можно сопоставить соответствующие операторы. Тогда действие оператора $\hat{O}$ на функцию f будет давать функции g .

Например: $g = f^2$, $g = 3f^3$, $g = df/dx$, $g = d^2f/dx^2$, $g = (7x^2 + 1)f$ и т. д.

Важно, что существует *единичный*, или *тождественный*, оператор, обозначаемый как $\mathbf{1}$ или 1 , действие которого на функцию дает функцию, тождественно равную исходной:

$$g = \mathbf{1}f \equiv f, \quad (10.2)$$

т. е. единичный оператор оставляет функцию неизменной.

4. В квантовой механике важную роль играют *линейные операторы*, определяемые свойством

$$\hat{O}(af + bg) = a\hat{O}f + b\hat{O}g, \quad (10.3)$$

где a и b — постоянные коэффициенты.

Примерами линейных операторов могут служить:

единичный оператор: $\hat{O} = 1$;

оператор умножения на число 3: $\hat{O} = 3$;

оператор умножения на функцию $7x^2 + 1$: $\hat{O} = 7x^2 + 1$;

операторы дифференцирования: $\hat{O} = d/dx$ и $\hat{O} = d^2/dx^2$.

Напротив, оператор, сопоставляющий некоторой функции ее куб, не является линейным оператором. Начиная с этого момента в дальнейшем будут рассматриваться *только* линейные операторы.

5. *Сумма (разность) линейных операторов* определяется как оператор $\hat{C} = \hat{A} \pm \hat{B}$, действие которого на f эквивалентно сумме (разности) результатов действия на f операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$\hat{C}f = (\hat{A} \pm \hat{B})f = \hat{A}f \pm \hat{B}f. \quad (10.4)$$

Свойства коммутативности (перестановочности) в сложении

$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A},$$

ассоциативности

$$\hat{A} + (\hat{B} + \hat{C}) = (\hat{A} + \hat{B}) + \hat{C}$$

и т. д., очевидно, присущи линейным операторам.

6. *Умножение оператора на число* эквивалентно умножению на это число результата действия оператора:

$$(a\hat{A})f = a(\hat{A}f). \quad (10.5)$$

7. *Произведение двух линейных операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$* , очевидно, обладает сочетательным (ассоциативным) свойством

$$(\hat{A}\hat{B})f = \hat{A}(\hat{B}f) \quad (10.6)$$

и свойством дистрибутивности

$$\hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}. \quad (10.7)$$

Перестановочное свойство умножения в общем случае не имеет места:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A},$$

т. е. два линейных оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ в общем случае *не коммутируют*. Например, оператор умножения на x , т. е. $\hat{A} = x$, и оператор однократного дифференцирования $\hat{B} = d/dx$ не коммутируют. В самом деле,

$$(\hat{A}\hat{B})f = \left(x \frac{d}{dx}\right)f = x \frac{df}{dx},$$

$$(\hat{B}\hat{A})f = \frac{d}{dx}(xf) = x \frac{df}{dx} + f.$$

8. *Коммутатор, или перестановочное соотношение*, для операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ обозначается как

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (10.8)$$

Коммутатору, очевидно, присуще следующее свойство:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]. \quad (10.9)$$

В качестве примера можно взять играющее важную роль в квантовой механике перестановочное соотношение

$$\left[\frac{d}{dx}, x\right] = 1, \quad (10.10)$$

в справедливости которого нетрудно убедиться непосредственно.

9. *Степени операторов* определяются как операторы, действие которых эквивалентно последовательному действию оператором основанием на данную функцию столько раз, сколько указано в показателе степени:

$$\hat{A}^n f = \underbrace{\hat{A}[\hat{A} \dots \hat{A}(\hat{A} f)]}_n; \quad (10.11)$$

например, для $\hat{A} = d/dx$

$$\hat{A}^2 = \frac{d^2}{dx^2}, \dots, \hat{A}^n = \frac{d^n}{dx^n}.$$

Очевидны следующие свойства степеней операторов:

$$\hat{A}^{n+m} = \hat{A}^n \cdot \hat{A}^m, \quad (10.12)$$

$$[\hat{A}^n, \hat{A}^m] = 0. \quad (10.13)$$

[Формула (10.13) означает, что любые две степени одного и того же оператора коммутируют между собой.]

10. *Оператор, обратный $\hat{A}$* , обозначим как $\hat{A}^{-1}$.

$\hat{A}^{-1}$ оказывается определенным *только* тогда, когда уравнение $\hat{A}f = g$ разрешимо относительно f . Тогда, по определению, $f = \hat{A}^{-1}g$.

(10.14)

Укажем свойства обратного оператора:

$$(\hat{A}^{-1} \cdot \hat{A})f = \hat{A}^{-1}(\hat{A}f) = \hat{A}^{-1}g = f,$$

иначе говоря,

$$\hat{A}^{-1} \cdot \hat{A} \equiv \mathbf{1}, \quad (10.15)$$

где $\mathbf{1}$ — оператор тождественного преобразования (т.е. единичный оператор).

В тоже время $(\hat{A}\hat{A}^{-1})g = \hat{A}(\hat{A}^{-1}g) = \hat{A}f$, т.е.

$$\hat{A} \cdot \hat{A}^{-1} \equiv \mathbf{1}. \quad (10.16)$$

Из (10.15) и (10.16) вытекает, что

$$[\hat{A}, \hat{A}^{-1}] = 0. \quad (10.17)$$

11. *Функции операторов.* Формальное определение: пусть имеются некоторая аналитически заданная функция $F(x)$ [например, $F(x) = \sin x$, $F(x) = e^{\alpha x}$, $F(x) = x^2/(1-x)$ и т.д.] и оператор $\hat{A}$. По аналогии с разложением в ряд Тейлора этой функции определим $F(\hat{A})$ как

$$F(\hat{A}) = \sum_0^{\infty} \frac{F^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n, \quad (10.18)$$

пользуясь тем обстоятельством, что понятия суммы и степени операторов уже были введены. Заметим, что это определение *не всегда* имеет смысл.

ПРИМЕР 1. Для оператора $\hat{A} = d/dx$ разложение экспоненты имеет вид

$$\begin{aligned} e^{\alpha \hat{A}} &= 1 + \alpha \hat{A} + \frac{\alpha^2}{2!} \hat{A}^2 + \dots + \frac{\alpha^n}{n!} \hat{A}^n + \dots = \\ &= 1 + \alpha \frac{d}{dx} + \frac{\alpha^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \dots = \sum_0^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n}; \end{aligned}$$

отсюда

$$e^{\alpha \frac{d}{dx}} f(x) = \sum_0^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n f(x)}{dx^n} = f(x + \alpha). \quad (10.19)$$

Таким образом, получается оператор сдвига аргумента функции.

ПРИМЕР 2. Для оператора $\hat{A} = x$ (оператора умножения на x)

$$F(\hat{A}) = F(x), \quad (10.20)$$

т. е. получается оператор умножения на $F(x)$.

12. *Функция двух (или более) операторов.* Попытаемся обобщить равенство (10.18) следующим образом:

$$F(\hat{A}, \hat{B}) = \sum_{n, m=0}^{\infty} \frac{F^{(n, m)}(0, 0)}{n! m!} \hat{A}^n \hat{B}^m, \quad (10.21)$$

где

$$F^{(n, m)}(x, y) = \frac{\partial^{n+m} F(x, y)}{\partial x^n \partial y^m}.$$

Это определение, однако, неоднозначно, если только операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют между собой: действительно, для некоммутирующих операторов

$$\hat{A}^2 \hat{B} \neq \hat{A} \hat{B} \hat{A} \neq \hat{B} \hat{A}^2.$$

Иногда в случаях, подобных данному, можно произвести симметризацию произведений операторов, положив, например,

$$\begin{aligned} \hat{A} \hat{B} &\rightarrow \frac{\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A}}{2}, \\ \hat{A}^2 \hat{B} &\rightarrow \frac{\hat{A}^2 \hat{B} + \hat{A} \hat{B} \hat{A} + \hat{B} \hat{A}^2}{3} \end{aligned} \quad (10.22)$$

и т. д.

Лекция 11

Собственные функции и собственные значения

Задача на собственные значения. Вообще говоря, эта задача заключается в том, чтобы исследовать и решить уравнение вида

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad (11.1)$$

где $\hat{A}$ — линейный оператор, a — число, ψ — функция, т.е. найти класс таких функций, действие данного оператора на которые сводится к умножению их на число. Эти функции называют *собственными функциями* данного оператора.

Обычно функция ψ считается регулярной и однозначной. Типичное ограничение, накладываемое на такую функцию ψ , — это требование конечности ψ повсюду, в том числе и на бесконечности. В случае ограниченных полей — замкнутых систем (например, на сегменте) — граничное условие есть обращение функции ψ в нуль на границе. Вообще говоря, решения уравнения (11.1) существуют *только* для специальных значений a , называемых *собственными значениями* оператора $\hat{A}$:

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n, \quad (11.2)$$

где a_n — собственные значения, а ψ_n — соответствующие им собственные функции.

ПРИМЕР. Не зависящее от времени уравнение Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\right)\psi = E\psi \quad (11.3)$$

приводит к задаче на собственные значения E_n для оператора полной энергии $E = (\hbar^2/2m)\nabla^2 + U$, которым соответствуют собственные функции ψ_n .

Вырождение. Собственные значения называются *невырожденными*, когда каждому из них соответствует (с точностью до постоянного множителя) лишь одна собственная функция ψ_n . В противном случае собственные значения называются *вырожденными* (двухкратно, трехкратно и т. д.).

Ортогональность собственных функций. Пусть $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$ — все собственные значения оператора $\hat{A}$ в (11.2) (число совпадающих друг с другом собственных значений характеризует кратность вырождения). Далее, пусть $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$ — соответствующие собственные функции. Согласно лекции 9, функции ψ_n образуют *ортогональную систему функций* для уравнения (11.3), если в качестве $\hat{A}$ взять оператор полной энергии (гамильтониан) системы.

Определение 1. Скалярным произведением функций f и g называется выражение

$$(g | f) = \int g^* f. \quad (11.4)$$

[Отметим, что $(g | f) \equiv (f | g)^*$.] Здесь знак интеграла в зависимости от характера функций f и g означает либо просто интеграл по dx , либо тройной интеграл по $d\tau = dx dy dz$, либо вообще сумму по всем точкам, в которых определены обе функции.

Определение 2. Функции f и g ортогональны, если

$$(g | f) = 0, \quad \text{т. е.} \quad \int g^* f \equiv 0. \quad (11.5)$$

Вопрос. При каких условиях собственные функции уравнения (11.2), соответствующие различным собственным значениям, будут ортогональны между собой?

Ответ. Для этого необходимо и достаточно, чтобы оператор $\hat{A}$ был эрмитов, именно:

Эрмитовы операторы.

Определение 3. Оператор $\hat{A}$ называется эрмитовым, если выполняется равенство

$$(g | \hat{A}f) = (\hat{A}g | f) \quad \text{или} \quad \int g^* \hat{A}f = \int (\hat{A}g)^* f. \quad (11.6)$$

Примеры эрмитовых операторов:

$$\hat{x}; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}; \quad \nabla^2; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}(x, y, z)$$

(для реализации эрмитовости этих операторов, вообще говоря, *необходимы* соответствующие граничные условия).

Лемма. Если оператор $\hat{A}$ эрмитов, то форма $(f | \hat{A}f)$ вещественна. (11.7)

Доказательство.

На основании свойства $(g | f) \equiv (f | g)^*$ и определения (11.6) имеем

$$(f | \hat{A}f) = (\hat{A}f | f) = (f | \hat{A}f)^*, \quad (11.7')$$

что и требовалось доказать.

Теорема 1. Если оператор $\hat{A}$ эрмитов, то все его собственные значения действительны. (11.8)

Доказательство.

Исходим из уравнения (11.2) $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$ обе части которого умножаем слева скалярно на ψ_n :

$$(\psi_n | \hat{A}\psi_n) = a_n(\psi_n | \psi_n);$$

пользуясь теперь свойством (11.6), получаем:

$$a_n = \frac{(\psi_n | \hat{A}\psi_n)}{(\psi_n | \psi_n)} = \frac{\text{Действительное}}{\text{Действительное}} = \text{Действительное},$$

что и требовалось доказать.

Теорема 2. Если оператор $\hat{A}$ эрмитов и собственные значения a_n и a_m различны, то соответствующие собственные функции взаимно ортогональны. (11.9)

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Следующие операции очевидны:

$$\begin{array}{l|l} \int \psi_m^* & \begin{array}{l} \hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \\ \hat{A}\psi_m = a_m\psi_m \\ (\hat{A}\psi_m)^* = a_m\psi_m^* \end{array} \\ - \int \psi_n & \end{array} \quad \left(\begin{array}{l} \text{вспомним, что собственные значения} \\ \text{эрмитовых операторов вещественны: } a_m^* = a_m! \end{array} \right)$$

$$\int \psi_m^* (\hat{A}\psi_n) - \int (\hat{A}\psi_m)^* \psi_n = (a_n - a_m) \int \psi_m^* \psi_n \equiv (a_n - a_m)(\psi_m | \psi_n).$$

Левая часть полученного равенства равна нулю ввиду эрмитовости оператора $\hat{A}$ ($m \neq n$); следовательно,

$$(a_n - a_m)(\psi_m | \psi_n) = 0,$$

так что при $a_n \neq a_m$

$$(\psi_m | \psi_n) \equiv \int \psi_m^* \psi_n = 0, \quad (11.9')$$

что и требовалось доказать.

Квазитеоремы.

Если произведение $(f | \hat{A}f)$ вещественно для всех функций f , то оператор $\hat{A}$ эрмитов [теорема, обратная лемме (11.7)]. (11.10)

Если все произведения $\psi_n | \psi_m$ равны нулю для всех $a_n \neq a_m$, то оператор $\hat{A}$ эрмитов [теорема, обратная теореме (11.9)]. (11.11)

Эти теоремы будут разъяснены позднее.

Нормированные ортогональные собственные функции.

Если $\hat{A}$ — эрмитов оператор, причем

$$a_1, a_2, \dots, a_n, \dots \text{ — собственные значения } \hat{A},$$

$$\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots \text{ — собственные функции } \hat{A}, \quad (11.12)$$

то любая ψ_r ортогональна любой ψ_s при $a_r \neq a_s$.

Если же имеет место вырождение ($a_r = a_s$), то следует применить процедуру, описанную в лекции 9 на стр. 47.

Нормировка. Общий метод нормировки функций состоит в следующем. Каждая функция ψ_n делится на $\sqrt{(\psi_n | \psi_n)}$. После того как все ψ_n поделены, для новых ψ_n справедливо равенство

$$(\psi_r | \psi_s) = \delta_{rs}. \quad (11.13)$$

Квазитеорема. Разложение «произвольной» функции f по собственным функциям ψ_n содержит в качестве коэффициентов произведения вида $(\psi_n | f)$:

$$f = \sum_n c_n \psi_n, \quad c_n = (\psi_n | f), \quad (11.14)$$

иначе говоря, имеет место тождество

$$f = \sum_n (\psi_n | f) \psi_n. \quad (11.15)$$

Справедливость этого утверждения будет показана позднее. Если тождество (11.15) верно для всех функций f , то систему функций (11.12) называют *полной системой ортогональных нормированных функций* (полной ортонормированной системой).

Полная система ортонормированных функций.

В конце лекции 9 уже говорилось о понятии полноты системы функций; к этому здесь следует добавить лишь соображения ортогональности и нормировки.

Определение. Среднее значение $\bar{A}$ оператора $\hat{A}$ относительно функции ψ равно

$$\bar{A} = \frac{(\psi | \hat{A}\psi)}{(\psi | \psi)}. \quad (11.16)$$

ПРИМЕР. Если $\hat{A} = x$, а функция ψ нормирована на 1, то

$$\bar{x} = \int \psi^* x \psi d\tau = \int x |\psi|^2 d\tau. \quad (11.17)$$

Следовательно, статистический вес, использованный при усреднении координаты x , равен $|\psi|^2$.

Теорема. Среднее значение эрмитова оператора представляет собой действительное число.

Доказательство следует из соотношений (11.7) и (11.16).

Квазитеорема. Если среднее значение оператора относительно всех функций вещественно, то этот оператор эрмитов.

Справедливость этой теоремы будет показана позднее; она просто следует из свойства (11.15).

Дополнение: δ -функция Дирака. По определению, δ -функция Дирака обладает следующими свойствами*:

$$\int \delta(x) dx = 1, \quad (11.18)$$

когда интервал интегрирования включает точку $x = 0$; в противном случае $\int \delta(x) dx = 0$ (рис. 8). Можно определить δ -функцию Дирака и с помощью предельных переходов

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2}, \quad (11.19)$$

или

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin \alpha x}{\pi x} \quad (11.20)$$

и др.

Эти определения отражают также свойство четности δ -функции.

Перечислим некоторые основные свойства δ -функции. Прежде всего

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a). \quad (11.21a)$$

Взяв теперь производную от обеих частей равенства (11.21) по a , получим другое свойство:

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta'(x - a) dx = f'(a). \quad (11.21b)$$

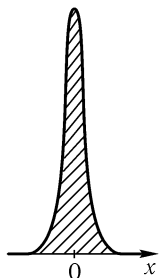


Рис. 8. Наглядное представление δ -функции Дирака. Площадь, ограниченная кривой, равна единице; высота пика бесконечна

Пользоваться осторожно!

Запишем теперь фурье-разложение δ -функции:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk. \quad (11.22)$$

Нетрудно видеть, что фурье-образ этой функции равен 1. По правилу (11.15) разложим δ -функцию в ряд по собственным функциям некоторой задачи:

$$\delta(x - x') = \sum_n (\psi_n(x) | \delta(x - x')) \psi_n(x);$$

учитывая (11.21), получаем:

$$\delta(x - x') = \sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x). \quad (11.23)$$

Лекция 12

Операторы материальной точки

Простейшей физической системой является материальная точка. Ниже рассматриваются некоторые операторы для этого случая.

Запишем шесть операторов, действующих на функцию $\psi(x, y, z)$:

$$\hat{x}; \quad \hat{y}; \quad \hat{z}; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} = \hat{p}_y; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} = \hat{p}_z; \quad (12.1)$$

все шесть операторов эрмитовы. Выясним, как они действуют на волновую функцию системы.

А. Средние значения. Предположим, что ψ описывает «малый» волновой пакет (рис. 9)

$$\psi \sim e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}}, \quad \mathbf{r} = (x, y, z).$$

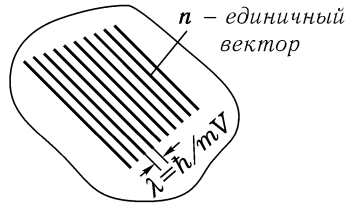


Рис. 9. Волновой пакет

Усреднив значения операторов по правилу (11.16), имеем:

$$\begin{aligned} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z} & \text{— средние координаты волнового пакета;} \\ \bar{p}_x, \bar{p}_y, \bar{p}_z & \text{— средние значения компонент вектора} \end{aligned} \quad (12.2)$$

импульса $mV \mathbf{n}$.

ЗАМЕЧАНИЕ. Для координат этот результат вполне очевиден. Для компонент импульса, например для $\bar{p}_x$,

$$\bar{p}_x = \frac{\left(\psi \left| \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right. \right)}{(\psi | \psi)} \approx \frac{\hbar}{\lambda} n_x = mV n_x,$$

поскольку для рассматриваемой функции

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \approx \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{\frac{i}{\hbar} n_x x} = \frac{\hbar}{\lambda} n_x \psi.$$

Из определения средних величин (12.2) ясно, что *операторы* (12.1) должны быть как-то *связаны с координатами и компонентами импульса* в их привычном классическом понимании. Убедимся в этом.

Б. Дальнейшее подтверждение. Запишем сумму потенциальной и кинетической энергий материальной точки:

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z) = H(x, \dots, p_x, \dots). \quad (12.3)$$

Истолкуем записанное таким образом выражение для полной энергии материальной точки как функцию операторов (12.1). Эта операторная функция определяется также по правилу (10.21), *но в данном случае определение вполне однозначно*. Итак,

$$\begin{aligned} U(x, y, z) &\rightarrow \hat{U}(x, y, z) \left[\begin{array}{l} \text{оператор умножения} \\ \text{на функцию } U(x, y, z) \end{array} \right], \\ p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 &\rightarrow \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = \\ &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + \dots \right\} = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right\} = -\hbar^2 \nabla^2. \end{aligned} \quad (12.4)$$

Следовательно, оператор, соответствующий энергии E (очевидно, эрмитов), может быть записан в виде

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}. \quad (12.5)$$

Применяя этот оператор к функции ψ , получаем:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \hat{U}\psi. \quad (12.6)$$

Член $\hat{U}\psi$ имеет смысл обычного умножения функции координат $U(x, y, z)$ на волновую функцию ψ . Оператор $\hat{H}$ называют *оператором полной энергии* или *оператором Гамильтона* (гамильтонианом). Из предыдущих примеров (особенно из рассмотрения линейного осциллятора и атома водорода) следует, что

Собственные значения оператора $\hat{H}$ представляют собой энергетические уровни системы.

В. Напрашивающиеся обобщения. Постулаты. Рассмотрим классические функции состояния системы (например, y -координату,

z -компоненту импульса, кинетическую энергию T , x -компоненту момента и т. п.). Все эти функции выражаются в классической физике как функции переменных x, y, z, p_x, p_y, p_z . Образует соответствующие операторные функции:

$$\hat{x}; \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}; \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2;$$

$$\hat{M}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \text{ и т. п.}$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Все эти операторы должны быть выбраны эрмитовыми, так как иначе их средние и собственные значения не будут вещественными.

Постулат 1. Единственно возможными результатами измерения функции, зависящей от координат и импульса,

$$F = F(x, y, z, p_x, p_y, p_z),$$

являются собственные значения соответствующего этой функции эрмитова оператора.

Постулат 2. Квантовомеханическое состояние системы определяется волновой функцией ψ . Функция ψ изменяется во времени таким образом, как того требует зависящее от времени уравнение Шредингера.

Вопрос. Как следует выбирать начальные значения функции ψ ?

Ответ. Измеряется некоторая величина $F(\mathbf{x}, \mathbf{p})$. Результат этого измерения должен совпадать с одним из собственных значений оператора $\hat{F}$, например с F_n . Если F_n является невырожденным собственным значением, то функция ψ непосредственно после измерения и будет собственной функцией оператора $\hat{F}$, соответствующей данному собственному значению. Если же имеет место вырождение, то необходимо большее число измерений, как выяснится позднее.

Задача на собственные значения:

$$\hat{G}g_n(\mathbf{x}) = G_n g_n(\mathbf{x}), \quad (12.7)$$

где $\hat{G}$ — эрмитов оператор, зависящий от $\mathbf{x}$ и $\mathbf{p}$; G_n — его собственное значение (число); $g_n(\mathbf{x})$ — собственная функция. Разложим ψ по

собственным функциям $g_n(\mathbf{x})$:

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_n b_n g_n(\mathbf{x}), \\ b_n &= (g_n | \psi) = \int g_n^* \psi d\tau;\end{aligned}\tag{12.8}$$

здесь b_n — коэффициенты разложения (числа), а ψ определяет состояние системы в момент времени t .

Постулат 3. При измерении величины $G(x, p)$ вероятность получить значение, равное G_n , пропорциональна $|b_n|^2$. (12.9)

Отсюда следует

Утверждение 1. Если ψ — нормированная функция, то

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

Доказательство.

$$\begin{aligned}1 &= (\psi | \psi) = \left(\sum_n b_n g_n \middle| \sum_s b_s g_s \right) = \sum_{n,s} b_n^* b_s (g_n | g_s) = \\ &= \sum_{n,s} b_n^* b_s \delta_{ns} = \sum_n b_n^* b_n = \sum_n |b_n|^2.\end{aligned}$$

Таким образом,

Если функция ψ нормирована на единицу, то $|b_n|^2$ = вероятность получить при измерении число $G = G_n$. (12.10)

Поэтому среднее значение возможных результатов измерения величины G (волновая функция ψ нормирована на единицу) равно

$$\begin{aligned}\bar{G} &= \sum_n |b_n|^2 G_n = \sum_n b_n^* b_n G_n = \sum_{n,s} b_s^* G_n b_n \delta_{ns} = \sum_{s,n} b_s^* G_n b_n (g_s | g_n) = \\ &= \left(\sum_s b_s g_s \middle| \sum_n b_n g_n G_n \right) = (\psi | \sum_n b_n G_n g_n) = \\ &= (\psi | G \sum_n b_n g_n) = (\psi | G\psi) = \frac{(\psi | G\psi)}{(\psi | \psi)};\end{aligned}$$

знаменатель $(\psi | \psi)$ в силу нормировки равен 1 [ср. с (11.16)]. Отсюда следует

Теорема. Среднее значение оператора $\hat{G}$ в смысле определения (11.16) равно взятому с весовыми множителями среднему значению всех возможных результатов измерения соответствующей физической величины $G(x, p)$.

Усложнения. Случай непрерывного множества собственных значений оператора $\hat{g}$.

ПРИМЕР 3. Рассмотрим операторное уравнение для оператора координаты $\hat{x}$

$$\hat{x}f(x) = x'f(x),$$

где x' — число. Решение этого уравнения имеет вид

$$f(x) = \delta(x - x')$$

$[\delta(x - x')]$ — соответствующая x' собственная функция]. Функция $\delta(x - x')$ не нормируема.

Однако если суммирование типа (12.8) заменить интегралом:

$$\begin{aligned} n &\rightarrow x', \\ g_n(x) &\rightarrow \delta(x - x'), \\ b_n = (g_n^* | \psi) &\rightarrow (\delta(x - x') | \psi) dx', \\ \sum_n &\rightarrow \int, \end{aligned}$$

то отсутствие обычной нормировки компенсируется бесконечно малым множителем dx' , и все формулы становятся корректными.

Таким образом, плотность вероятности того, что значение координаты материальной точки есть $x = x'$, равна

$$|(\delta(x - x') | \psi(x))|^2 = \left| \int \delta(x - x') \psi(x) dx \right|^2 = |\psi(x')|^2. \quad (12.11)$$

Знакомый результат! Среднее значение координаты x определяется как

$$\bar{x} = (\psi | x\psi) = \int x |\psi|^2 dx \quad (12.12)$$

(функция ψ нормирована на единицу).

ПРИМЕР 4. Рассмотрим импульс материальной точки; ему соответствует оператор

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}. \quad (12.13)$$

Уравнение для собственных значений имеет вид ($\hat{p}$ — оператор, p' — число)

$$\hat{p}f(x) = p'f(x), \quad (12.14)$$

или

$$\frac{\hbar}{i} f'(x) = p'f(x).$$

Запишем общее решение уравнения (12.14):

$$f(x) = e^{\frac{i}{\hbar} p' x}. \quad (12.15)$$

Это собственная функция, соответствующая собственному значению p' , которое может быть любым:

$$-\infty < p' < +\infty.$$

В этом случае снова возникает некоторое затруднение при нормировке, так как функция (12.15) непосредственно *не нормируема*. В таких случаях суммы типа (12.8) нужно преобразовать следующим образом:

$$n \rightarrow p', \quad g_n^*(x) \rightarrow e^{\frac{i}{\hbar} p' x},$$

$$b_n = (g_n^* | \psi) \rightarrow (e^{\frac{i}{\hbar} p' x} | \psi), \quad \sum_n \rightarrow \int \frac{dp'}{2\pi\hbar}; \quad (12.16)$$

теперь

$$\delta(x - x') = \sum_n g_n^* g_n(x) \rightarrow \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p'(x-x')} = \delta(x - x')$$

[отметим множитель $1/2\pi\hbar$: он вводится ради полноты, см. (11.23) и (11.22)].

Вероятность того, что импульс системы имеет величину в интервале $p', p' + dp'$, равна (ψ нормирована)

$$\frac{dp'}{2\pi\hbar} \left| \left(e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \mid \psi(x) \right) \right|^2 \quad (12.17)$$

или

$$\frac{dp'}{2\pi\hbar} \left| \int e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} \psi(x) dx \right|^2. \quad (12.18)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Отсюда непосредственно следует вывод, что искомая вероятность пропорциональна квадрату модуля коэффициента фурье-разложения. Полезно убедиться, что полная вероятность равна единице, как следует из (12.17) и (12.18) и нормировки $\psi(x)$.

Среднее значение импульса. Для среднего значения импульса можно указать два выражения:

1) вытекающее из (12.18)

$$\bar{p} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int p' dp' \left| \int e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} \psi(x) dx \right|^2; \quad (12.19)$$

2) вытекающее из определения среднего (см. стр. 62–63) при учете нормировки

$$\begin{aligned} \bar{p} &= (\psi \mid \hat{p}\psi) = \frac{\hbar}{i} (\psi \mid \psi') = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \psi' dx = -\frac{\hbar}{i} \int \psi'^* \psi dx = \\ &= \frac{\hbar}{2i} \int (\psi^* \psi' - \psi'^* \psi) dx \end{aligned}$$

(интеграл $\int \psi^* \psi' dx$ вычислялся по частям). Рекомендуется самостоятельно доказать, что равенства (12.19) и (12.20) эквивалентны.

[**Указание:** записать правую часть (12.19) в виде двойного интеграла по координатам x и x' и использовать (12.17) и (12.18).]

Лекция 13

Принцип неопределенности

Пусть частица имеет *точно определенное значение координаты* x , а именно $x = x'$. Очевидно, соответствующая волновая функция должна иметь вид $\psi(x) = \delta(x - x')$. Все коэффициенты ее фурье-разложения равны между собой; следовательно, частица в таком состоянии с равной вероятностью может иметь *любое* значение импульса:

$$\delta x = 0 \rightarrow \delta p = \infty. \quad (13.1)$$

С другой стороны, при *определенном значении импульса* $p = p'$

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} p' x}, \quad |\psi|^2 = 1. \quad (13.2)$$

Следовательно, в этом случае никак не фиксировано положение точки в пространстве:

$$\delta p = 0 \rightarrow \delta x = \infty.$$

Можно рассмотреть также промежуточный случай (рис. 10)

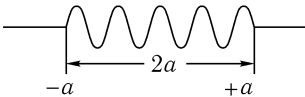


Рис. 10. Одномерный волновой пакет шириной $2a$

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx}, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a, \end{cases}$$

т. е. случай

$$\delta x = a. \quad (13.3)$$

Из формулы (12.18) следует, что

$$\int_{-a}^{+a} e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} e^{ikx} dx = \int_{-a}^{+a} e^{i\left(k - \frac{p'}{\hbar}\right)x} dx = \frac{\sin\left[\left(p' - \hbar k\right) \frac{a}{\hbar}\right]}{p' - \hbar k} \cdot 2\hbar.$$

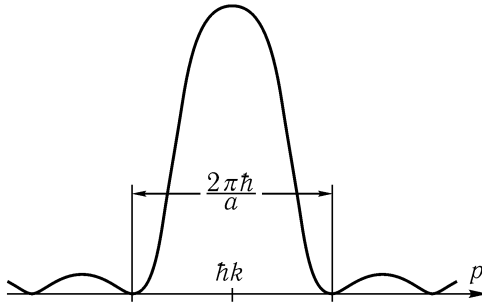


Рис. 11. График плотности вероятности распределения импульса в случае $\delta x = a$

Плотность вероятности того, что значение импульса частицы равно p' при этом будет пропорциональна величине

$$\sin^2 \left[(p' - \hbar k) \frac{a}{\hbar} \right] / (p' - \hbar k)^2.$$

Распределение этой вероятности показано на чертеже (рис. 11); трудно видеть, что разброс значений импульса укладывается в интервал

$$\delta p' = \frac{\pi \hbar}{a}. \quad (13.4)$$

Сравнивая формулы (13.3) и (13.4), получаем:

$$\begin{aligned} \delta x \delta p &\approx a \frac{\pi \hbar}{a} \approx \pi \hbar, \\ \text{или } \delta x \delta p &\approx \hbar. \end{aligned} \quad (13.5)$$

Этот результат известен как *гейзенберговское соотношение неопределенностей*. Строгий формальный расчет показывает, что для любой волновой функции ψ выполняется неравенство

$$\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (13.6)$$

Доказательство для одномерной области можно найти в учебнике

Э.Персико¹. Полезные для изучения примеры рассматриваются в «Квантовой механике» Л.Шиффа, где отчетливо видна *взаимная дополнительность* координаты x и импульса p в согласии с соотношением (13.5)².

Дополнительность временной координаты t и энергии системы E

$$\delta t \delta E \approx \hbar \quad (13.7)$$

имеет ряд важных аспектов:

1. Частота, характерная для кратковременных явлений δt , имеет широкий разброс (полосу $\delta\omega$). Подобно соотношениям (13.3) и (13.4) находим:

$$\delta t \delta\omega \approx 1. \quad (13.8)$$

В квантовой механике $E = \hbar\omega$, откуда непосредственно следует соотношение (13.7).

Энергетические состояния систем с коротким временем жизни не могут быть определены более точно, чем допускает формула (13.7).

2. Анализ процесса измерений свидетельствует о том, что для точного определения энергии (для достижения достаточно малого значения δE) требуется по крайней мере промежуток времени

$$\delta t \approx \hbar / \delta E.$$

Все это будет более детально обсуждаться позднее.

¹Э. Ферми рекомендует курс Enrico Persico, *Fundamentals of Quantum Mechanics*, ed. G. M. Temmer, N. Y., 1950, p. 110–119. Соответствующие разделы этого курса приведены в комментарии (*) к настоящей странице в конце «Конспектов». Целесообразно протудировать эти выдержки прежде, чем продолжать изучение «Конспектов». — *Прим. ред.*

²См. Л. Шифф, *Квантовая механика*, ИЛ, 1959, стр. 17–27; кроме того, ввиду важности вопроса полезно ознакомиться с его изложением у различных авторов: см., например, П. А. М. Дирак, *Принципы квантовой механики*, М., 1960, стр. 143; А. А. Соколов и др., *Квантовая механика*, Учпедгиз, 1962, стр. 146; Д. И. Блохинцев, *Основы квантовой механики*, Высшая школа, 1961, стр. 55. — *Прим. ред.*

Лекция 14

Матрицы

Функции на многообразии. На многообразии, включающем конечное число точек (назовем их $1, 2, \dots, n$), некоторую функцию f можно понимать как совокупность n (комплексных) чисел $f_1, f_2, \dots, f_n$. Переход к непрерывному многообразию (например, к пространству одного или более измерений) можно рассматривать как предельный переход $n \rightarrow \infty$; при этом функцию в дискретных пространствах (до предельного перехода) можно изображать с помощью таблиц.

Перейдем теперь к рассмотрению многообразия, *включающего лишь n точек*.

Функция на многообразии как вектор. Итак, функция

$$f \equiv (f_1, f_2, \dots, f_n) \quad (14.1)$$

рассматривается как вектор с комплексными компонентами (n -мерный комплексный вектор). Переход к пределу $n \rightarrow \infty$ (причем возможен случай даже бесконечного непрерывного множества) ведет к отождествлению понятий функции и вектора в гильбертовом пространстве. Ниже будут доказаны теоремы для ограниченного числа точек n ; в ряде случаев эти теоремы могут быть обобщены. Введем понятие скалярного произведения функций

$$f \equiv (f_1, f_2, \dots, f_n) \quad \text{и} \quad g \equiv (g_1, g_2, \dots, g_n);$$
$$(g | f) = \sum_{s=1}^n g_s^* f_s \quad (14.2)$$

[это аналог формулы (11.4)]. Заметим, что

$$(g | f) = (f | g)^*. \quad (14.3)$$

Модуль «вектора» f определяется соотношением

$$|f|^2 = (f | f) = \sum_{s=1}^n |f_s|^2. \quad (14.4)$$

Единичный «вектор» представляет собой такой «вектор», модуль которого равен единице: $(e | e) = 1$. (14.5)

Векторы f и g ортогональны, если $(f | g) = 0$, или, что то же самое, $(g | f) = 0$. (14.6)

Базис. Введем базис из n линейно независимых векторов:

$$e^{(1)}, e^{(2)}, \dots, e^{(n)}. \quad (14.7)$$

Необходимым и достаточным условием линейной независимости n векторов является отсутствие какой-либо линейной комбинации их, равной нулю, когда хотя бы один коэффициент в ней отличен от нуля. Это условие можно выразить в форме

$$\det \|e_k^i\| \neq 0. \quad (14.8)$$

Любую функцию f можно представить в виде линейной комбинации базисных векторов $e^{(i)}$:

$$f = \sum_i a_i e^i. \quad (14.9)$$

Чтобы определить коэффициенты a_i в таком разложении, необходимо решить систему n линейных уравнений, причем детерминант, составленный из коэффициентов при неизвестных, должен быть отличен от нуля.

Ортонормированный базис. Базис называют ортогональным и нормированным, если

$$(e^i | e^k) = \delta_{ik}. \quad (14.10)$$

В этом случае коэффициенты разложения определяются особенно просто. Действительно, умножая левую и правую части равенства (14.9) скалярно на e^k и используя условие ортогональности (14.10), очевидно получаем:

$$(f | e^i) = a_i. \quad (14.11)$$

Таким образом, можно записать тождество

$$f = \sum_i a_i e^i = \sum_i (e^i | f) e^i. \quad (14.12)$$

Операторы. Оператор $\widehat{\theta}$ есть операция, при которой «вектор» f переходит в «вектор» g , определенный на том же многообразии:

$$g = \widehat{\theta} f. \quad (14.13)$$

Равенство (14.13) означает, что «вектор» g равен результату действия оператора $\widehat{\theta}$ на вектор f . Таким образом, компоненты вектора g являются функциями от компонент вектора f :

$$g_k = \theta_k(f_1, \dots, f_n). \quad (14.14)$$

Иначе говоря, n функций $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n$, каждая из которых зависит от n переменных, в совокупности определяют оператор $\widehat{\theta}$.

Линейные операторы. Линейные операторы определяются (аналогично случаю, рассмотренному в лекции 10, стр. 49) свойством

$$\widehat{\theta}(af + bg) = a\widehat{\theta}f + b\widehat{\theta}g, \quad (14.15)$$

где a и b — постоянные, а f и g — произвольные «векторы».

Теорема 3. На конечном многообразии самый общий линейный оператор сводится к линейной однородной комбинации, иначе говоря,

$$\begin{aligned} &\text{если } g = \widehat{\theta} f, \text{ то} \\ &g_1 = a_{11}f_1 + \dots + a_{1n}f_n, \\ &\dots\dots\dots \\ &g_n = a_{n1}f_1 + \dots + a_{nn}f_n, \end{aligned} \quad (14.16)$$

или

$$g_k = \sum_{l=1}^n a_{kl} f_l,$$

где a_{kl} — постоянные.

Доказательство.

Оператор (14.16), очевидно, линейный. Требуется доказать, что он имеет форму, единую для всех линейных операторов. Допустим, что

оператор $\widehat{\mathcal{O}}$, определенный по (14.14), является линейным. Воспользуемся равенством (14.15) в форме

$$\widehat{\mathcal{O}}(p + \varepsilon f) = \widehat{\mathcal{O}}p + \varepsilon \widehat{\mathcal{O}}f, \quad (14.17)$$

где p и f — функции, а ε — бесконечно малая константа; тогда

$$(\widehat{\mathcal{O}}p)_k = \mathcal{O}_k(p_1, \dots, p_n),$$

$$(\widehat{\mathcal{O}}f)_k = \mathcal{O}_k(f_1, \dots, f_n),$$

$$\begin{aligned} (\widehat{\mathcal{O}}(p + \varepsilon f))_k &= \mathcal{O}_k(p_1 + \varepsilon f_1, \dots, p_n + \varepsilon f_n) = \\ &= \mathcal{O}_k(p_1, \dots, p_n) + \varepsilon \left(\frac{\partial \mathcal{O}_k(p)}{\partial p_1} f_1 + \frac{\partial \mathcal{O}_k(p)}{\partial p_2} f_2 + \dots \right). \end{aligned}$$

В последнем выражении член $\mathcal{O}_k(p_1 + \varepsilon f_1, \dots)$ разложен в ряд Тейлора в окрестности каждой его «точки» $p_1, \dots, p_n$, а затем члены разложения, содержащие бесконечно малые порядка, выше первого, были опущены. Сравнивая этот результат с условием линейности (14.17), находим:

$$(\widehat{\mathcal{O}}f)_k = \sum \frac{\partial \mathcal{O}_k(p)}{\partial p_i} f_i.$$

Коэффициенты в этой сумме не зависят от компонент f_i и, следовательно, постоянны, что и требовалось доказать.

В дальнейшем будут рассматриваться только линейные операторы типа (14.16).

Матричное представление операторов. Линейный оператор (14.16), записанный в виде квадратной $n \times n$ -матрицы, составленной из коэффициентов a_{ik} , имеет вид

$$\mathcal{O} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (14.18)$$

(оператор-матрицу не следует смешивать с детерминантом той же матрицы; детерминант представляет собой *одно число*).

Можно ввести также прямоугольные матрицы (n строк $\times t$ столбцов). Например, «вектор» f можно записать в виде вертикального столбца (матрицы $n \times 1$)

$$f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}. \quad (14.19)$$

Алгебра матриц. Определим основные операции над матрицами:

Умножить матрицу на число a значит умножить все ее элементы на число a :

$$a \|a_{ik}\| = \|aa_{ik}\|. \quad (14.20)$$

Сложение и вычитание (допустимое только для матриц, имеющих одинаковое число строк и одно и то же число столбцов, причем число строк и число столбцов не обязательно должны совпадать) приводит к матрице-сумме (разности), все элементы которой являются суммами (или разностями) соответствующих элементов первоначальных матриц¹:

$$\left\| \begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{matrix} \right\| + \left\| \begin{matrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{matrix} \right\| = \left\| \begin{matrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} & a_{13}+b_{13} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} & a_{23}+b_{23} \end{matrix} \right\|. \quad (14.21)$$

Теоремы. Элементарные свойства операторов (14.15) совпадают со свойствами матриц.

Это означает, что алгебра матриц, определяемая операциями (14.20) и (14.21), *полностью эквивалентна* алгебре линейных операторов, определенных свойством (14.15).

Произведение двух матриц A и B

$$AB = C \quad (14.22)$$

определено *только* в том случае, если матрица A имеет столько же столбцов, сколько матрица B строк. Операция умножения двух матриц

¹ Существует ряд теорем, касающихся свойств введенных здесь операций над матрицами (см.: *Ф. Р. Гантмахер*, Теория матриц, М., 1953; *А. Г. Курош*, Курс высшей алгебры, М., 1955; *Б. Л. Ван-дер-Варден*, Современная алгебра, М.-Л., 1947, ч. 1).
— *Прим. ред.*

определяется следующими свойствами:

$$\begin{aligned}
 A = \|a_{ik}\|; \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad \text{где } n & \text{ — число строк,} \\
 & k = 1, 2, \dots, m, \quad m & \text{ — число столбцов;} \\
 B = \|b_{jl}\|; \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad \text{где } m & \text{ — число строк,} \\
 & l = 1, 2, \dots, p, \quad p & \text{ — число столбцов.}
 \end{aligned} \tag{14.23}$$

Произведение $C = AB$ есть матрица

$$\begin{aligned}
 C = \|c_{rs}\|; \quad r = 1, 2, \dots, n, \quad \text{где } n & \text{ — число строк,} \\
 & s = 1, 2, \dots, p, \quad p & \text{ — число столбцов.}
 \end{aligned}$$

Перемножение матриц A и B дает матрицу C , у которой столько строк, сколько их у матрицы A , и столько столбцов, сколько у матрицы B :

$$\begin{array}{c} \uparrow n \\ \boxed{A} \\ \leftarrow m \end{array} \times \begin{array}{c} \boxed{B} \\ \leftarrow p \end{array} \begin{array}{c} \uparrow m \\ \downarrow m \end{array} = \begin{array}{c} \leftarrow p \\ \boxed{C} \\ \uparrow n \end{array} \tag{14.24}$$

Элементы матрицы, получаемой в результате операции умножения, находят по правилу

$$c_{rs} = \sum_{k=1}^m a_{rk} b_{ks}. \tag{14.25}$$

Правило перемножения: *Строка $\times$ Столбец.*

Чрезвычайно важный частный случай. Произведение квадратных матриц ($n \times n$), подобных матрице (14.18), имеет следующие свойства:

а. Произведение AB также является квадратной матрицей порядка n .

б. Произведение матриц, взятых в обратном порядке, есть также квадратная матрица порядка n , но в общем случае произведение BA отличается от AB :

$$\begin{aligned}
 (AB)_{rs} &= \sum_k a_{rk} b_{ks}, \\
 (BA)_{rs} &= \sum_k b_{rk} a_{ks}.
 \end{aligned} \tag{14.26}$$

Вплоть до формулы (14.34) речь будет идти исключительно о квадратных матрицах.

Теорема. *Детерминант произведения двух квадратных матриц равен произведению детерминантов этих матриц:* (14.27)

$$\det(AB) = \det A \cdot \det B.$$

Доказательство этой теоремы очевидно: умножение квадратных матриц производится точно по такому же правилу, как и перемножение детерминантов (Строка $\times$ Столбец)*.

Определение. *Коммутатор или перестановочное соотношение* (допустимое лишь в случае квадратных матриц) есть форма вида

$$[A, B] = AB - BA. \quad (14.28)$$

Очевидное свойство коммутатора:

$$[A, B] = -[B, A].$$

Определение. *Единичная матрица* есть матрица вида

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad (14.29)$$

т. е. квадратная матрица, элементы главной диагонали в которой суть единицы, а остальные элементы — нули**.

Свойства единичной матрицы:

$$\begin{aligned} \mathbf{1}A &= A\mathbf{1} = A, \\ [A\mathbf{1}] &= [\mathbf{1}A] = 0. \end{aligned} \quad (14.30)$$

Эти свойства непосредственно следуют из (14.26).

Определение. Матрица B , обратная матрице A ,

$$B = A^{-1}, \quad (14.31)$$

определяется соотношением

$$A^{-1}A = AA^{-1} = \mathbf{1}.$$

Вопрос. Когда существует обратная матрица?

Ответ. Обратная матрица существует, когда $\det A \neq 0$, так как лишь в этом случае реализуемо *правило*

$$(A^{-1})_{rs} = \frac{\text{adj}(A)_{rs}}{\det(A)_{pq}}. \quad (14.32)$$

Рекомендуется проверить это правило непосредственно.

Два свойства обратных матриц:

$$\det(A^{-1}) = \frac{1}{\det A}, \quad (14.33)$$

$$[A^{-1}, A] = 0. \quad (14.34)$$

Важное свойство. Для матриц, представляющих операторы [например, (14.16)], все данные выше определения алгебраических операций могут быть выведены также из алгебры операторов, изложенной в лекции 10, и согласуются с ней (рекомендуется провести проверку этого утверждения шаг за шагом для всех операций). В частности, для квадратных матриц можно установить функциональную зависимость одной матрицы от другой точно так же, как это было сделано в лекции 10 [см. равенства (10.18) и (10.21)].

Определение. *Произведение квадратной матрицы на вертикальную матрицу-столбец* [соответственно матриц типа (14.18) и (14.19)] определяется как

$$\widehat{\partial} f = g; \quad \boxed{} \times \boxed{} = \boxed{} \quad (14.35)$$

где g — вертикальный столбец, полученный согласно правилу умножения матриц (14.25) в соответствии с выражениями (14.16).

Следовательно, равенство (14.35) можно понимать с равным правом

либо как правило

$$\begin{aligned} \text{Квадратная матрица } \mathcal{O} \times \text{Вертикальный столбец } f = \\ = \text{Вертикальный столбец } g, \end{aligned} \quad (14.36)$$

либо как правило

Оператор $\widehat{\mathcal{O}}$, действуя на функцию f , дает функцию g .

Транспонированная матрица.

Транспонированная матрица, соответствующая матрице A , будет обозначаться как $\tilde{A}$.

Определение. $\tilde{A}$ = Матрица A , в которой строки и столбцы поменялись ролями, или (эквивалентно)

$$(\tilde{A})_{ik} = A_{ki}. \quad (14.37)$$

Частные случаи. Пусть A — квадратная матрица (например, матрица-оператор); тогда $\tilde{A}$ получается путем замены каждого элемента матрицы A на элемент, расположенный *симметрично* данному относительно главной диагонали.

Пусть f — вертикальный столбец (функция или «вектор»); тогда $\tilde{f}$ есть горизонтальная строка $\|f_1, f_2, \dots, f_n\|$.

Матрица, комплексно сопряженная данной. Такая матрица будет обозначаться как A^* .

Определение. Матрица A^* есть комплексно сопряженная матрице A , если каждый ее элемент — комплексно сопряженное соответствующего элемента матрицы A :

$$(A^*)_{ik} = A_{ik}^*. \quad (14.38)$$

Матрица, эрмитово сопряженная данной. Операция эрмитава сопряжения играет чрезвычайно важную роль в квантовой механике. Матрицу, эрмитово сопряженную матрице A , мы будем обозначать как A^+ .

Определение. Матрица A^+ получается из A путем последовательного применения к матрице A операций транспонирования и комплексного сопряжения:

$$(A^+)_{ik} = A_{ki}^*.$$

(14.39)

ПРИМЕР 1.

$$A = \begin{vmatrix} 1 & 2+i & 3 \\ 2 & 1+i & 1-i \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad A^+ = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2-i & 1-i & 0 \\ 3 & 1+i & 1 \end{vmatrix}.$$

ПРИМЕР 2.

$$f = \begin{vmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{vmatrix}, \quad f^+ = \|f_1^*, f_2^*, f_3^*\|. \quad (14.40)$$

Свойства эрмитово сопряженных матриц. Пусть f и g — «вертикальные столбцы», т. е. функции. Тогда [см. определение (14.23)–(14.25)]

Произведение $g^+ f$ есть матрица с одной строкой и одним столбцом, т. е. просто число:

$$g^+ f = \sum_1^n g_s^* f_s = (g | f). \quad (14.41)$$

Пусть $A, B, C, \dots, K, L$ — матрицы с таким (вообще говоря, неодинаковым для разных матриц) числом строк и столбцов, что может быть определено их произведение, т. е. матрица

$$P = A \cdot B \cdot C \dots K \cdot L.$$

Чтобы такое произведение существовало, необходимо, чтобы число строк у матрицы, получаемой при каждом шаге перемножения, равнялось числу столбцов следующей матрицы.

Важное свойство произведения (14.42а) состоит в том, что

$$P^+ = L^+ \cdot K^+ \dots C^+ \cdot B^+ \cdot A^+,$$

(14.42)

т.е. эрмитово сопряженное произведение матриц есть произведение в обратном порядке эрмитово сопряженных матриц. Справедливость этого утверждения очевидным образом вытекает из приведенных определений операций.

В случае матрицы $g^+ f$, состоящей из одной строки и одного столбца (14.41), эрмитово сопряжение *совпадает* с обычным комплексным сопряжением:

$$(g^+ f)^+ = (g^+ f)^* = f^+ g = (f \mid g). \quad (14.43)$$

Лекция 15

Эрмитовы матрицы.

Задача на собственные значения

Определение. Квадратную $(n \times n)$ -матрицу называют *эрмитовой* (или *самосопряженной*), если каждый из ее элементов комплексно сопряжен элементу, симметричному данному относительно главной диагонали; иначе говоря, матрица A эрмитова, если

$$a_{ik} = a_{ki}^*.$$

Отсюда: эрмитова матрица тождественно равна своей эрмитово сопряженной и наоборот (самосопряженность):

$$A \text{ (эрмитова)} = A^+. \quad (15.2)$$

Например, все следующие матрицы:

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 0 & -i & e^{i\alpha} \\ i & 0 & e^{-i\beta} \\ e^{-i\alpha} & e^{i\beta} & 3 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$$

— эрмитовы (самосопряженные). Следует заметить, что

Диагональные элементы эрмитовых матриц есть либо действительные числа, либо нули:

$$a_{ii} = \text{Действительное число (или нуль)}.$$

Из предыдущих определений очевидным образом вытекает:

Теорема. Если $A, B, C, \dots$ — эрмитовы матрицы и если $a, b, c, \dots$ — действительные числа, то комбинация

$$aA + bB + cC + \dots$$

также есть эрмитова матрица.

Теорема. Если матрица A эрмитова, то возведение ее в любую степень дает эрмитову матрицу: (15.5)

$$A^s = (A^s)^+.$$

Доказательство.

$$(A^s)^+ = (A A \dots A)^+ = A^+ \dots A^+ A^+ = (A^+)^s = A^s.$$

Теорема. Если матрица A эрмитова, то (15.6)

$$\det A = \text{Действительное число}.$$

Доказательство.

$$\det A = \det(A^+) = [\det(A^+)]^* = [\det(A)]^*.$$

Теорема. Если матрица A эрмитова, то обратная ей матрица A^{-1} также эрмитова: (15.7)

$$A^{-1} = (A^{-1})^+.$$

Доказательство.

$\mathbf{1} = AA^{-1} = (A^+)^{-1}A^+ = (A)^{-1}A$, так как A и $\mathbf{1}$ — эрмитовы матрицы, $(A^{-1})^+$ должна быть также эрмитовой.

Из этих теорем вытекает следующая

Важная теорема. Пусть $F(x)$ — вещественная функция вещественной переменной x , такая, что ей можно сопоставить матрицу $F(A)$, т. е. определенную функцию от матрицы A в соответствии с (10.18). Тогда если матрица A эрмитова, то и $F(A)$ эрмитова: (15.8)

$$F(A)^+ = F(A).$$

Доказательство.

В самом деле, разложение функции $F(x)$ в ряд содержит лишь действительные коэффициенты и справедливы теоремы (15.5) и (15.4): $F(A)^+ = F(A)$.

Существенны следующие

Два свойства эрмитовых матриц:

Если матрицы A и B эрмитовы, то их произведение AB в общем случае не является эрмитовым, но симметризованное произведение эрмитово: (15.9)

$$C = \frac{1}{2}(AB + BA) = C^+.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

$$C^+ = \frac{1}{2}(B^+A^+ + A^+B^+) = \frac{1}{2}(BA + AB) = C.$$

Свойство (15.9) позволяет во многих случаях определить матрицу $F(A, B)$, являющуюся функцией двух (или более) матриц, таким образом, что:

Если символ F означает действительную функцию своих переменных и если матрицы A и B эрмитовы, то (15.10)

$F(A, B)$ — эрмитова матрица.

Такую матричную функцию $F(A, B)$ особенно легко определить, если эрмитовы матрицы A и B коммутируют: основанием для этого служит следующая

Теорема. Пусть A и B — эрмитовы матрицы и $[A, B] = 0$; тогда произведение $P = A \cdot B \cdot A \cdot A \cdot B \cdot B$ или другие подобные произведения A и B также являются эрмитовыми: (15.11)

$$P^+ = P.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

Записав выражение для P^+ , последовательно переставляем в нем сомножители, пользуясь условиями, указанными в посылке теоремы, пока не получим равенство $P^+ = P$.

Укажем теперь одно важное

Свойство. Определение эрмитовых операторов (11.16) находится в согласии с определением эрмитовых матриц (11.1). Действительно, если $A = \tilde{A}$, то (15.12)

$$(g | Af) = g^+ Af = g^+ A^+ f = (Ag)^+ f = (Ag | f).$$

Доказательство аналогично доказательству теоремы (11.9).

Теорема. Если все n корней секулярного уравнения обладают кратностью 1, то каждому собственному значению a_s соответствует единственная собственная функция ψ_s (с точностью до постоянного множителя). (15.17)

Доказательство этой теоремы дается в алгебре детерминантов.

Правило построения ψ_s . Подставим в секулярный детерминант (15.14) a_s вместо a . Тогда n алгебраических дополнений любой строки детерминанта будут пропорциональны компонентам вектора $\psi^{(s)}$. (15.18)

Задачи.

1. Построить собственные векторы матрицы-оператора

$$A = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

и нормировать их на единицу.

2. Прodelать то же самое для матриц

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

Случай вырождения. Рассмотрим вопрос о вырождении в случае эрмитовых матриц-операторов.

Собственное значение, являющееся решением секулярного уравнения и обладающее кратностью q , соответствует q линейно независимым собственным функциям. Этот вывод следует из алгебры детерминантов. Такие собственные функции могут быть выбраны ортогональными и нормированными на единицу. (15.19)

Полезно обсудить геометрическую аналогию (с эллипсоидом).

Выберем ортонормированную систему собственных функций

$$\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(n)}; \quad \psi^{+(r)}\psi^{(s)} = \delta_{rs} \quad (15.20)$$

в качестве *базиса* векторного пространства. Разложим произвольную функцию f в ряд по этим собственным функциям:

$$f = \sum_s (\psi^{(s)} | f) \psi^{(s)}. \quad (15.21)$$

В результате мы получили уже известное выражение (11.14) или (11.15), «доказав» тем самым соответствующую квазитеорему лекции 11; все остальные квазитеоремы этой лекции могут быть также просто доказаны путем сведения их к простым алгебраическим свойствам матриц.

Построим теперь аналог формулы (11.23) для случая дискретных собственных значений. Положим в (15.21)

$$f \rightarrow f_\varrho = \delta_{\varrho\sigma},$$

где σ — фиксированный, а ϱ — переменный индексы:

$$f_\varrho = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \leftarrow \sigma \quad \text{так что} \quad (\psi^{(s)} | f) = \psi_\sigma^{*(s)}.$$

Следовательно,

$$\delta_{\varrho\sigma} = \sum_s \psi_\sigma^{*(s)} \psi_\varrho^{(s)}. \quad (15.22)$$

Иначе можно записать:

$$\sum_s \psi^{(s)} \psi^{+(s)} = \mathbf{1}, \quad (15.23)$$

где $\mathbf{1}$ — единичная $n \times n$ -матрица (матрица тождественного преобразования).

Вывод. Матрица-оператор полностью определяется заданием своих собственных векторов и соответствующих собственных значений. Действительно, при этом правая сторона уравнения

$$Af = \sum_s a_s (\psi^{(s)} | f) \psi^{(s)} \quad (15.24)$$

определяется однозначно, что и соответствует определению оператора.

Лекция 16

Унитарные матрицы и преобразования

Пусть A и B — эрмитовы операторы, а

$$\left. \begin{array}{cccc} \psi^{(1)}, & \psi^{(2)}, & \dots & \psi^{(n)} \\ a_1 & a_2 & \dots & a_n \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{ортонормированная система} \\ \text{собственных функций и собст-} \\ \text{венные значения оператора } \hat{A}. \end{array} \quad (16.1)$$

и

$$\left. \begin{array}{cccc} \varphi^{(1)}, & \varphi^{(2)}, & \dots & \varphi^{(n)} \\ b_1 & b_2 & \dots & b_n \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{ортонормированная система} \\ \text{собственных функций и собст-} \\ \text{венные значения оператора } \hat{B}. \end{array} \quad (16.2)$$

Задача. Требуется найти матрицу преобразования T , которая переводила бы $\varphi^{(s)}$ в $\psi^{(s)}$:

$$T\varphi^{(s)} = \psi^{(s)}. \quad (16.3)$$

Решение. Умножим это равенство справа на $\varphi^{+(s)}$:

$$T\varphi^{(s)}\varphi^{+(s)} = \psi^{(s)}\varphi^{+(s)}.$$

Суммируя по s и используя свойство (15.23), получаем:

$$T = \sum_s \psi^{(s)}\varphi^{+(s)}. \quad (16.4)$$

Здесь обнаруживается аналогия с преобразованиями координат.

Преобразованию векторов при переходе от одной системы координат к другой можно придать матричную форму. Как станет ясно в дальнейшем, при таких преобразованиях особенно важную роль играют преобразования, описываемые *унитарными* матрицами.

Определение. Матрицу Q называют *унитарной*, если она имеет следующее определяющее свойство:

$$Q^+Q = \mathbf{1}, \quad \text{или} \quad Q^+ = Q^{-1}. \quad (16.5)$$

Теорема. Матрица T унитарна:

$$T^+T = \mathbf{1}. \quad (16.6)$$

Доказательство.

Производя эрмитово сопряжение, получаем:

$$T^+ = \left(\sum \psi^{(s)} \varphi^{+(s)} \right)^+ = \sum \varphi^{(s)} \psi^{+(s)},$$

а на основании (15.20) и (15.23) находим окончательно:

$$T^+T = \sum_{s, \sigma} \varphi^{(s)} \psi^{+(s)} \psi^{(\sigma)} \varphi^{+(\sigma)} = \sum_{s, \sigma} \varphi^{(s)} \delta_{s\sigma} \varphi^{+(\sigma)} = \sum_s \varphi^{(s)} \varphi^{+(s)} = \mathbf{1}.$$

Теорема. Если матрица T унитарна, то

$$(Tf \mid Tg) = (f \mid g). \quad (16.7)$$

Доказательство.

$$(Tf \mid Tg) = (Tf)^+Tg = f^+T^+Tg = f^+g = (f \mid g).$$

Теорема. Если матрица T унитарна, а $\psi^{(s)}$ — ортонормированная система n векторов, то результат преобразования $T\psi^{(s)} = \varphi^{(s)}$ также дает ортонормированную систему векторов. (16.8)

Доказательство очевидным образом следует из теоремы (16.7).

Вывод. Унитарные преобразования переводят один ортонормированный базис в другой.

писи для вертикальных столбцов,

$$x = \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \end{Bmatrix}, \quad x' = \begin{Bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ \vdots \end{Bmatrix},$$

это соотношение принимает вид

$$x' = T^+ x = T^{-1} x, \quad x = T x'. \quad (16.116)$$

Вывод. Преобразование координат описывается той же матрицей, что и *обратное* преобразование базисных векторов.

Преобразование, индуцируемое матрицей-оператором $\hat{A}$.

Вопрос. Если матричный оператор $\hat{A}$ определяет некоторое линейное преобразование координат x некоторого вектора, то какое соответствующее линейное преобразование $\hat{A}'$ действует на координаты x' этого же вектора в другой координатной системе?

Ответ. Пользуясь преобразованием (16.116), заметим, что

$$x = T x', \quad \hat{A} x = \hat{A} T x' = T \hat{A}' x'.$$

Отсюда:

$$T^{-1} \hat{A} T x' = \hat{A}' x'$$

для произвольных значений x' . Следовательно,

$$\hat{A}' = T^{-1} \hat{A} T = T^+ \hat{A} T \quad (16.12)$$

и наоборот, $\hat{A} = T \hat{A}' T^{-1} = T \hat{A}' T^+.$

Таким образом, матрица T преобразует оператор $\hat{A}$ в оператор $\hat{A}'$.

Свойства преобразований. Рассмотрим ряд свойств матриц-операторов, широко используемых в квантовомеханических расчетах.

1. Если $\hat{A}' = T^{-1} \hat{A} T$, $\hat{B}' = T^{-1} \hat{B} T$, то

$$\begin{aligned} \hat{A}' \pm \hat{B}' &= T^{-1} (\hat{A} \pm \hat{B}) T, & \hat{A}'^n &= T^{-1} \hat{A}^n T, \\ \hat{A}' \hat{B}' &= T^{-1} (\hat{A} \hat{B}) T, & F(\hat{A}') &= T^{-1} F(\hat{A}) T, \\ \mathbf{1} &= T^{-1} \mathbf{1} T \end{aligned} \quad (16.13)$$

и т. д.

Доказательство этих свойств производится путем непосредственной проверки.

2. Алгебра операторов $\hat{A}', \hat{B}', \dots$ совпадает с алгеброй операторов $\hat{A}, \hat{B}, \dots$.

3. Оператору $\hat{A}'$ соответствуют *те же самые собственные значения*, что и оператору $\hat{A}$, а их собственные функции связаны между собой следующим образом:

$$\psi'(s) = T^{-1}\psi(s) = T^+\psi(s), \quad (16.14)$$

или

$$T\psi'(s) = \psi(s).$$

Определение. След, или *шпур*, квадратной матрицы A есть

$$\text{Sp}(A) = \sum_{s=1}^n A_{ss}, \quad (16.15)$$

т. е. равен сумме элементов, стоящих на главной диагонали.

Существенно, что *шпур* имеет смысл только для квадратных матриц.

Полезно знать следующее свойство шпура: *циклическая перестановка матриц* в произведении под знаком Sp оставляет значение шпура этого произведения неизменным:

$$\text{Sp}(AB \dots YZ) = \text{Sp}(ZAB \dots Y).$$

Теорема. Шпуры матриц A и A' совпадают:

$$\begin{aligned} \text{Sp}(A') &= \text{Sp}(T^+AT) = \sum_{ikr} (T_{ik}^+ A_{kr} T_{ri}) = \sum_{kr} A_{kr} (TT^+)_{rk} = \\ &= \sum_{kr} A_{kr} \delta_{kr} = \sum A_{kk} = \text{Sp}(A). \end{aligned} \quad (16.16)$$

Задача. Определить унитарную матрицу T , приводящую заданную эрмитову матрицу A к диагональному виду A' :

$$A' = T^+ AT.$$

Решение (см. (16.9)). $T = \sum_s \psi^{(s)} e^{+(s)}.$

В самом деле, $A' = T^+ AT =$

$$= \sum_{s, \sigma} e^{(s)} \psi^{+(s)} A \psi^{(\sigma)} e^{+(\sigma)} = \sum_{s, \sigma} a_{\sigma} e^{(s)} \psi^{+(s)} \psi^{(\sigma)} e^{+(\sigma)} = \quad (16.17)$$

$$= \sum_s a_s e^{(s)} e^{+(s)} = \sum_s a_s \times \begin{vmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \end{vmatrix} \xleftarrow{s} \begin{vmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_s & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & a_n \end{vmatrix}.$$

$\uparrow$
 s

(Здесь использованы равенства $A \psi^{(\sigma)} = a_{\sigma} \psi^{(\sigma)}$ и $\psi^{+(s)} \psi^{(\sigma)} = \delta_{s\sigma}$.) Таким образом, матрица A преобразована в диагональную матрицу A' , на главной диагонали которой стоят собственные значения матрицы A . Матрица T преобразует первоначальный базис $e^{(s)}$ в базис $\psi^{(s)}$. Это означает, что A *приводится к диагональному виду* с помощью *перехода* к новому координатному базису, а именно к *базису*, в котором роль базисных векторов играют ее *собственные функции*. Отсюда вытекает

Теорема. *Шпур оператора $\hat{A}$ равен сумме его собственных значений:* $\text{Sp}(\hat{A}) = \sum_1^n a_s.$ (16.18)

Доказательство очевидно следует из (16.17) и (16.16).

Теперь можно дать *новое определение* матрицы $F(A)$. Сделаем это в три шага.

Определение. *Первый шаг:* приведем матрицу A к диагональному виду A' методом (16.17):

$$A' = T^+ AT, \quad A = T A' T^+.$$

Второй шаг: возьмем в качестве $F(A')$ матрицу

$$F(A') = \begin{vmatrix} F(a_1) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & F(a_2) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & F(a_3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \quad (16.19)$$

Третий шаг: вернемся к прежнему базису

$$F(A) = T F(A') T^+.$$

С помощью равенства (16.13) легко доказать справедливость этого определения. Определение (16.19) эквивалентно общему определению, данному в лекции 10, во всех случаях, когда последнее имеет смысл. Однако определение (16.19) не накладывает ограничений на функции F .

Теорема. *Перестановочное соотношение $[A, F(A)] = 0$ выполняется и тогда, когда функции от матрицы определены правилом (16.19).* (16.20)

Доказательство.

Коммутатор $[A', F(A')]$, очевидно, равен нулю, так как обе матрицы диагональны. Воспользовавшись теперь преобразованием T в соответствии с (16.13), легко получить равенство (16.20), что и требовалось.

Обратная теорема. Если матрицы A и B коммутируют, причем A — невырожденная матрица, то имеет место соотношение $B = F(A)$. (16.21)

Доказательство.

Приведем A к диагональному виду, следуя методу (16.17):

$$A' = T^+ A T = \begin{vmatrix} a_1 & 0 & \dots \\ 0 & a_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

Сделаем то же с матрицей B :

$$B' = T^+ B T$$

(при этом заведомо неизвестно, диагональна ли матрица B'). Из $[a, B] = 0$ следует, что $[A', B'] = 0$, так что в компонентах

$$[A', B']_{ik} = (a_i - a_k)b'_{ik} = 0.$$

Но поскольку $a_i \neq a_k$ при $i \neq k$, то отсюда следует, что $b'_{ik} = 0$ при $i \neq k$. Следовательно, матрица B' также диагональна и равна

$$B' = \begin{vmatrix} b_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & b_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & b_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

Тогда можно записать равенство $B' = F(A')$, если в качестве функции F взять одну из того бесконечного множества функций, для которых

$$F(a_1) = b_1, \quad F(a_2) = b_2, \quad \dots, \quad F(a_n) = b_n.$$

Остается лишь произвести обратное преобразование и использовать определение (16.19). Теорема доказана.

Заметим, что по ходу дела фактически была доказана следующая

Теорема. Если невырожденная матрица B коммутирует с диагональной матрицей A , то матрица B должна быть также диагональна. (16.22)

Если в теореме (16.22) диагональная матрица A является вырожденной, то B не обязательно должна быть диагональна, но имеет характерный вид, который можно усмотреть из следующего примера, с легкостью поддающегося обобщению:

$$\text{если } A = \begin{vmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_2 \end{vmatrix}, \text{ то } B = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} & 0 & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{33} & b_{34} & b_{35} \\ 0 & 0 & b_{43} & b_{44} & b_{45} \\ 0 & 0 & b_{53} & b_{54} & b_{55} \end{vmatrix}. \quad (16.23)$$

Важное приложение. Устанавливаемые теоремой (16.22) и обобщением (16.23) факты находят в квантовой механике важное приложение:

Пусть A и B — эрмитовы матрицы и пусть $[A, B] = 0$. Разрешим задачу на собственные значения оператора $\hat{A}$, как указано в лекции 15 [см. (15.13) и (15.14)], затем приведем к диагональному виду по (16.17) матрицы A и B :

$$A' = T^+ A T; \quad B' = T^+ B T.$$

Матрицы A' и B' коммутируют; значит, если матрица A невырожденная, то, по (16.22), матрица B' диагональна: тем самым решена задача на собственные значения оператора $\hat{B}$.

Если же A вырожденная, то B' имеет вид, подобный (16.23); тогда ее секулярное уравнение распадается на более простые уравнения, порядок которых равен кратности вырождения собственных значений матрицы A .

(16.24)

Лекция 17

Наблюдаемые

Наблюдаемая есть функция состояния системы¹.

1. В квантовой механике каждой наблюдаемой Q ставится в соответствие линейный оператор (также обозначаемый через $\hat{Q}$).

Если значения наблюдаемой представляют собой существенно действительные числа, то соответствующий ей оператор $\hat{Q}$ — эрмитов.

2. Измерение наблюдаемой величины Q может дать только одно из собственных значений оператора $\hat{Q}$:

$$\hat{Q}f_{q'} = q'f_{q'}, \quad (17.1)$$

где q' — собственное значение оператора $\hat{Q}$, а $f_{q'}$ — соответствующая собственная функция оператора $\hat{Q}$.

3. Состояние системы описывается функцией ψ (обычно нормируемой на единицу — нормирующий множитель не играет принципиальной роли).

4. Как определить ψ ?

При измерении Q находят $Q = q'$. Отсюда, если собственное значение q' невырожденное, заключают, что

$$\psi = f_{q'}. \quad (17.2)$$

Если q' — вырожденное собственное значение, то волновая функция ψ равна линейной комбинации всех собственных функций, соответствующих этому значению q' (вектор ψ принадлежит подпространству q'). При этом уравнение

$$\hat{Q}\psi = q'\psi \quad (17.3)$$

определяет подпространство q' .

¹О понятии наблюдаемой более подробно см. в книге П. А. М. Дирака, *Принципы квантовой механики*, М., 1960, гл. II. — Прим. ред.

Чтобы определить ψ внутри подпространства, выберем новую наблюдаемую p , такую, чтобы она коммутировала с $\hat{Q}$:

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = 0. \quad (17.4)$$

Теорема. Если $[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$ и $\hat{Q}\psi = q'\psi$, т. е. если ψ принадлежит подпространству q' , то $\hat{P}\psi$ также принадлежит подпространству q' , т. е.

$$\hat{Q}(\hat{P}\psi) = q'(p\psi).$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

$$\hat{Q}(\hat{P}\psi) = \hat{Q}\hat{P}\psi = \hat{P}\hat{Q}\psi = \hat{P}q'\psi = q'(\hat{P}\psi).$$

Рассмотрим $\hat{P}$ как оператор в подпространстве q' . Число соответствующих собственным значениям и собственным функциям равно числу измерений подпространства q' , задаваемого совместными решениями уравнений

$$\begin{aligned} \hat{Q}\psi &= q'\psi, \\ \hat{P}\psi &= p'\psi, \end{aligned} \quad (17.6)$$

где p' — собственное значение оператора $\hat{P}$ в подпространстве $Q = q'$. Система уравнений (17.6) определяет под-подпространство ($Q = q'$, $P = p'$). Если это под-подпространство имеет только одно измерение, то система (17.6) определяет ψ (с точностью до множителя). В противном случае ψ сводится к под-подпространству. В таком случае вводят в рассмотрение третью наблюдаемую R , такую, что

$$[\hat{R}, \hat{Q}] = 0, \quad [\hat{R}, \hat{P}] = 0. \quad (17.7)$$

Оператор $\hat{R}$ действует в под-под-подпространстве, определяемом системой уравнений

$$\hat{Q}\psi = q'\psi, \quad \hat{P}\psi = p'\psi, \quad \hat{R}\psi = r'\psi. \quad (17.8)$$

Если это под-под-подпространство обладает лишь одним измерением, то функция ψ определена. Если же нет, то следует продолжать процедуру до тех пор, пока не будет получено одномерное подпространство.

5. Если волновая функция ψ известна, то при измерении наблюдаемой $\hat{A}$ вероятность получить $A = a'$ равна

$$|(f_{a'} | \psi)|^2.$$

6. Изменение «вектора состояния» ψ во времени. Пусть оператор H — гамильтониан (разумеется, эрмитов, поскольку энергия — действительная величина). Тогда уравнение Шредингера с временной частью записывается в виде

$$i\hbar\dot{\psi} = \hat{H}\psi; \quad (17.9)$$

таким образом,

$$-i\hbar\dot{\psi}^+ = \psi^+ \hat{H}^+ = \psi^+ \hat{H}. \quad (17.10)$$

Теорема. Величина $\psi^+\psi$ (т. е. норма волновой функции) есть константа, не зависящая от времени. Тем самым, если волновая функция $\psi(0)$ нормирована в начальный момент времени, то она, $\psi(t)$, также нормирована и в любой другой момент времени. (17.11)

Доказательство.

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^+\psi = \dot{\psi}^+\psi + \psi^+\dot{\psi};$$

отсюда, учитывая (17.9) и (17.10), имеем:

$$\psi^+\dot{\psi} + \dot{\psi}^+\psi = (1/i\hbar)\psi^+\hat{H}\psi - (1/i\hbar)\psi^+\hat{H}\psi = 0,$$

что и требовалось доказать.

7. Имеет место следующее соответствие между классическим гамильтонианом H и квантовомеханическим оператором $\hat{H}$:

Если классически $H = H(q_1, q_2, \dots, p_1, p_2, \dots)$, то для получения квантовомеханического оператора полной энергии $\hat{H}$ следует заменить (17.12)

$$p_j \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} \equiv \hat{p}_j.$$

Однако эта операция не всегда дает однозначный результат.

Введенные операторы действуют на функции вида

$$f = f(q_1, \dots, q_s).$$

Каждый из индексов $1, 2, \dots, s$ у величины q' представляет собой сокращенную запись даже сколь угодно большого набора индексов (s — сокращенная запись всех индексов).

8. *Переход к матричной записи.* Часто удобно преобразовать операторы к матричному виду в ортонормированном базисе, выбрав в качестве базисных векторов собственные функции какого-либо часто используемого оператора, например гамильтониана или невозмущенного гамильтониана. Будем для простоты рассматривать систему, имеющую только *одну* обобщенную координату q , и положим $q = x$.

Систему ортонормированных базисных функций запишем как

$$\psi^{(1)}(x), \psi^{(2)}(x), \dots, \psi^{(n)}(x), \dots \quad (17.13)$$

Унитарная матрица преобразования [см. (16.9)] имеет вид

$$T = \begin{vmatrix} \psi^{(1)}(x') & \psi^{(2)}(x') & \dots & \psi^{(n)}(x') & \dots \\ \psi^{(1)}(x'') & \psi^{(2)}(x'') & \dots & \psi^{(n)}(x'') & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi^{(1)}(x^{(n)}) & \psi^{(2)}(x^{(n)}) & \dots & \psi^{(n)}(x^{(n)}) & \dots \end{vmatrix}. \quad (17.14)$$

Матрица вдвойне бесконечна! Действительно, число строк и столбцов бесконечно, причем номера столбцов $1, 2, \dots, n, \dots$ могут быть дискретными, а могут быть и непрерывными; все значения «номеров» строк $x', x'', \dots, x^{(n)}, \dots$ обычно образуют бесконечное непрерывное множество. Работая с матрицей (17.14), необходимо быть осторожным в выкладках!

«Вектор-функция» $f(x) = \sum \varphi_n \psi^{(n)}$ обладает коэффициентами разложения

$$\varphi_n = (\psi^{(n)} | f) = \int \psi^{*(n)} f dx = \int \psi^{+(n)} f dx,$$

где

$$\begin{array}{ll} f(x'), & f(x''), & f(x'''), & \dots & \text{— старые компоненты } f, \\ \varphi_1, & \varphi_2, & \varphi_3, & \dots & \text{— новые компоненты } f. \end{array} \quad (17.15)$$

Оператор $\hat{A}$ переходит в $T^+ \hat{A} T = \hat{A}'$, причем

$$\hat{A} = \left\| \begin{array}{c} A_{11} A_{12} \dots A_{1n} \dots \\ A_{21} A_{22} \dots A_{2n} \dots \\ A_{31} A_{32} \dots A_{3n} \dots \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\|; \quad (17.16)$$

$$A_{nm} = (\psi^{(n)} | \hat{A} \psi^{(m)}) = \int \psi^{*(n)}(x) \hat{A} \psi^{(m)}(x) dx.$$

Если $\hat{A}$ — эрмитов оператор, то $A_{nm} = A_{mn}^*$.

A_{nm} — матричный элемент оператора A между состояниями n и m .

В другой записи

$$\begin{aligned} A_{nm} &= \langle \psi^{(n)} | \hat{A} | \psi^{(m)} \rangle \equiv \langle n | \hat{A} | m \rangle, \\ \psi^{(m)} &\equiv |m\rangle = ket(км), \\ \psi^{+(n)} &\equiv \langle n | = brac(бра)^1. \end{aligned} \quad (17.17)$$

ПРИМЕР. Волновые функции гармонического осциллятора (4.17)

$$\psi^{(n)}(x) = u_n(x) \quad (17.18)$$

являются собственными функциями оператора

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2.$$

После унитарного преобразования (17.14) матрица гамильтониана $\hat{H}$ приводится к диагональному виду

$$H = \left\| \begin{array}{ccccc} \frac{1}{2} \hbar \omega & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2} \hbar \omega & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} \hbar \omega & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} \hbar \omega & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right\|, \quad (17.19)$$

$$H_{nm} = H_{nm} \delta_{nm} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{nm}.$$

¹Это так называемые *дираковские обозначения*, широко используемые в современной квантовой теории. — *Прим. ред.*

Определим матрицу x и матрицу p . Из (17.18) и перестановочного соотношения $\widehat{p}\widehat{x} - \widehat{x}\widehat{p} = \hbar/i$ получим:

$$\frac{\hbar}{im}\widehat{p} = \widehat{H}\widehat{x} - \widehat{x}\widehat{H},$$

или

$$\frac{\hbar}{im}p_{rs} = (\widehat{H}\widehat{x} - \widehat{x}\widehat{H})_{rs} = (H_{rr} - H_{ss})x_{rs} = \hbar\omega(r-s)x_{rs}.$$

(17.20)

Аналогичным образом из перестановочного соотношения

$$\widehat{H}\widehat{p} - \widehat{p}\widehat{H} = -\frac{\hbar}{i}m\omega^2x$$

(17.21)

следует, что

$$-\frac{\hbar}{i}m\omega^2x_{rs} = \hbar\omega(r-s)p_{rs}.$$

Отсюда после очевидных преобразований имеем:

$$x_{rs} = (r-s)^2x_{rs}.$$

Следовательно, $\left. \begin{matrix} x_{rs} \neq 0, \\ p_{rs} \neq 0 \end{matrix} \right\}$ только при $r = s \pm 1$,

$$p_{r, r+1} = -im\omega x_{r, r+1}.$$

(17.22)

Найдем величину $x_{r, r+1}$. Прежде всего из (17.18), (17.19) и (17.22) имеем:

$$|x_{r, r+1}|^2 + |x_{r-1, r}|^2 = \frac{\hbar\omega}{m\omega^2} \left(r + \frac{1}{2} \right).$$

Отсюда

$$|x_{r, r+1}|^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (r+1).$$

Учитывая произвольность выбора фазы в рассматриваемых комплексных выражениях, возьмем

$$\begin{aligned} x_{r, r+1} &= x_{r+1, r} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{r+1}, \\ p_{r, r+1} &= -p_{r+1, r} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \sqrt{r+1}. \end{aligned} \quad (17.23)$$

Эти результаты удобно изобразить в виде матриц как

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix},$$

$$p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{vmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \quad (17.24)$$

Читателю предлагается, исходя из представления (17.24), вновь проверить равенство $\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = \hbar/i$.

Важные линейные комбинации:

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix},$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} = \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}; \quad (17.25)$$

здесь $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ — *неэрмитовы* операторы (операторы уничтожения и порождения частиц в квантовой теории поля).

Предлагаем читателю проверить перестановочные соотношения для операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$:

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1. \quad (17.26)$$

ЛЕКЦИЯ 18

Момент импульса

Момент импульса, или момент количества движения, в квантовой механике, как и в классической физике, определяется выражением (в квантовой механике — операторным)*

$$\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{x}} \times \widehat{\mathbf{p}}. \quad (18.1)$$

В компонентах

$$\begin{aligned} \widehat{M}_x &= \widehat{y}\widehat{p}_z - \widehat{z}\widehat{p}_y = X, \\ \widehat{M}_y &= \widehat{z}\widehat{p}_x - \widehat{x}\widehat{p}_z = Y, \\ \widehat{M}_z &= \widehat{x}\widehat{p}_y - \widehat{y}\widehat{p}_x = Z. \end{aligned} \quad (18.2)$$

Оператор квадрата момента импульса строится, как обычно:

$$\widehat{M}^2 = \widehat{M}_x^2 + \widehat{M}_y^2 + \widehat{M}_z^2. \quad (18.3)$$

Нетрудно доказать следующие перестановочные соотношения:

$$\begin{aligned} [\widehat{M}_x, \widehat{M}_y] &= i\hbar\widehat{M}_z, & [\widehat{M}_y, \widehat{M}_z] &= i\hbar\widehat{M}_x, \\ [\widehat{M}_z, \widehat{M}_x] &= i\hbar\widehat{M}_y, \end{aligned} \quad (18.4)$$

или

$$[\widehat{\mathbf{M}} \times \widehat{\mathbf{M}}] = i\hbar\widehat{\mathbf{M}}, \quad (18.5)$$

$$[\widehat{M}_x, \widehat{\mathbf{M}}^2] = 0, \quad [\widehat{M}_y, \widehat{\mathbf{M}}^2] = [\widehat{M}_z, \widehat{\mathbf{M}}^2] = 0. \quad (18.6)$$

$$[\widehat{r}^2, \widehat{M}_x] = [\widehat{r}^2, \widehat{M}_y] = [\widehat{r}^2, \widehat{M}_z] = 0, \quad (18.7)$$

$$[\widehat{r}^2, \widehat{\mathbf{M}}^2] = 0. \quad (18.8)$$

При использовании системы единиц, в которой $\hbar = 1$, перестановочные соотношения (18.4) принимают в обозначениях (18.2) вид

$$[X, Y] = iZ, \quad [Y, Z] = iX, \quad [Z, X] = iY. \quad (18.9)$$

Теперь нужно перейти к представлению, в котором матрица $\widehat{\mathbf{M}}^2$ диагональна.

Найдем собственные значения оператора $\widehat{\mathbf{M}}^2$. Операторы (18.2) и (18.3) в полярных координатах запишутся как

$$\widehat{M}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \widehat{\mathbf{M}}^2 = -\hbar^2 \Lambda, \quad (18.10)$$

где Λ — угловая часть лапласиана (6.11).

Из выражений (18.2) видно, что любые две компоненты $\widehat{\mathbf{M}}$ не коммутируют друг с другом и, следовательно, в любом представлении может быть диагональной только одна из трех компонент $\widehat{M}_x$, $\widehat{M}_y$, $\widehat{M}_z$. Однако все три компоненты $\widehat{\mathbf{M}}$ одновременно коммутируют с оператором $\widehat{\mathbf{M}}^2$ [см. (18.6)]. Поэтому одновременно с матрицей-оператором $\widehat{\mathbf{M}}^2$ можно диагонализировать одну из компонент $\widehat{\mathbf{M}}$ (например, $\widehat{M}_z$). Таким образом, в квантовой механике наблюдаемыми могут одновременно быть $\widehat{\mathbf{M}}^2$ и одна из компонент $\widehat{\mathbf{M}}$.

Вывод.

$$\left. \begin{aligned} \widehat{\mathbf{M}}^2 \text{ имеет собственные значения } \hbar^2 l(l+1); l = 0, 1, 2, \dots; \\ \widehat{M}_z \text{ имеет собственные значения } \hbar m; m = \dots - 2, -1, 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \right| \quad (18.11)$$

Здесь m — магнитное, а l — орбитальное квантовые числа.

Собственные функции оператора $\widehat{\mathbf{M}}^2$ (в единицах $\hbar = 1$):

$$\mathbf{M}^2 = l(l+1), \quad \psi = f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (18.12)$$

Итак, собственные функции $(2l+1)$ -кратно вырождены по магнитному квантовому числу m (это вырождение накладывается еще на вырождение радиальных собственных функций).

На каждое значение $\mathbf{M}^2 = l(l+1)$ приходится $(2l+1)$ значений M_z :

$$M_z = m = (l, l-1, l-2, \dots, -l). \quad (18.13)$$

Укажем в использованном представлении конкретный вид матриц $\widehat{M}_x$, $\widehat{M}_y$ и $\widehat{M}_z$:

$$\begin{aligned}\widehat{M}_x &= \hbar \begin{vmatrix} l & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & l-1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & l-2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -l \end{vmatrix}, \\ \widehat{M}_y &= \frac{\hbar}{2} \begin{vmatrix} 0 & -ib_l & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ ib_l & 0 & -ib_{l-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & ib_{l-1} & 0 & -ib_{l-2} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -ib_{-l+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & ib_{-l+1} & 0 \end{vmatrix}, \\ \widehat{M}_z &= \frac{\hbar}{2} \begin{vmatrix} 0 & b_l & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b_l & 0 & b_{l-1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & b_{l-1} & 0 & b_{l-2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{l-2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b_{-l+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{-l+1} & 0 \end{vmatrix},\end{aligned}\quad (18.14)$$

где $b_s = \sqrt{(l+s)(l+1-s)}$ (см. у Шиффа, стр. 170).

Справедливость этих формул можно доказать, исходя либо из свойств сферических гармоник, либо из перестановочных соотношений. В дальнейшем мы проведем более общее рассмотрение свойств оператора момента импульса.

В заключение выпишем вид матриц момента при $l = 0$ и $l = 1$:

$$l = 0, \quad \widehat{\mathbf{M}}^2 = \|0\|, \quad \widehat{M}_x = \widehat{M}_y = \widehat{M}_z = \|0\|; \quad (18.15)$$

$$\begin{aligned}l = 1, \quad \widehat{\mathbf{M}}^2 &= 2 \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \widehat{M}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \\ \widehat{M}_x &= \begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{vmatrix}, \quad \widehat{M}_y = \begin{vmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{vmatrix}, \\ \widehat{M}_x + i\widehat{M}_y &= \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \widehat{M}_x - i\widehat{M}_y = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{vmatrix}.\end{aligned}\quad (18.16)$$

Отличные от нуля матричные элементы последних двух неэрмитовых операторов равны соответственно

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar}\langle m+1|\widehat{M}_x+i\widehat{M}_y|m\rangle &= \sqrt{(l+m+1)(l-m)}; \\ \frac{1}{\hbar}\langle m-1|\widehat{M}_x-i\widehat{M}_y|m\rangle &= \sqrt{(l+m)(l+1-m)}.\end{aligned}\tag{18.17}$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Оператор $\widehat{M}_x+i\widehat{M}_y$ переводит состояние $|m\rangle$ в состояние $|m+1\rangle$, а оператор $\widehat{M}_x-i\widehat{M}_y$ переводит то же состояние $|m\rangle$ в состояние $|m-1\rangle$, так что оператор $\widehat{M}_x+i\widehat{M}_y$ увеличивает, а оператор $\widehat{M}_x-i\widehat{M}_y$ уменьшает значение m на единицу.

(18.18)

ЛЕКЦИЯ 19

Зависимость наблюдаемых от времени. Гейзенберговское представление

Унитарное преобразование $\widehat{S}(t)$. Зависящее от времени уравнение Шредингера

$$i\hbar\dot{\psi} = \widehat{H}\psi \quad (19.1)$$

может быть использовано для определения следующего унитарного преобразования, зависящего от времени:

Преобразование $\widehat{S}(t)$ переводит вектор $\varphi(0)$, соответствующий моменту $t = 0$, в вектор $\varphi(t)$, соответствующий моменту t .¹ (19.2)

Заметим, что в теории дифференциальных уравнений φ получают, интегрируя уравнение

$$i\hbar\dot{\varphi} = \widehat{H}\varphi \quad (19.3)$$

на интервале от 0 до t , причем в качестве начального значения φ берется величина $\varphi(0)$.

Из теоремы (17.11) непосредственно следует, что *оператор $\widehat{S}(t)$ должен быть унитарным:* если

$$\begin{aligned} \varphi(t) &= \widehat{S}(t)\varphi(0), \\ \text{то} \quad \varphi(0) &= \widehat{S}^{-1}(t)\varphi(t) = \widehat{S}^+(t)\varphi(t). \end{aligned} \quad (19.4)$$

В частности, для волновой функции

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \widehat{S}(t)\psi(0), \\ \psi(0) &= \widehat{S}^+(t)\psi(t). \end{aligned} \quad (19.5)$$

¹Напомним, что в классической механике переход от момента времени $t = 0$ к другому моменту t можно рассматривать как каноническое преобразование. — *Прим. ред.*

Если гамильтониан $\hat{H}$ не зависит от времени, явное выражение для $\hat{S}(t)$ имеет вид

$$\hat{S}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad (19.6)$$

что легко проверить, непосредственно подставив (19.6) в равенство (19.5), а затем в уравнение (19.1):

$$\hat{S}^+(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad (19.7a)$$

так как гамильтониан $\hat{H}$ — эрмитов оператор. В общем случае $\hat{S}$ -матрица определяется уравнением

$$\dot{\hat{S}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{S}(t), \quad \text{или} \quad \dot{\hat{S}}^+(t) = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{S}^+(t). \quad (19.7b)$$

Шредингеровское представление. В этом представлении система описывается «вектором» состояния $\psi(t)$, *зависящим от времени.*

Переменные во времени «векторные» компоненты амплитуды $\psi(t)$ задаются в гильбертовом пространстве с *не зависящим от времени базисом* $\mathbf{B}(0)$:

$$e^{(1)} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{Bmatrix}, \quad e^{(2)} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{Bmatrix}, \quad \dots \quad (19.8)$$

Любая не содержащая временной зависимости наблюдаемая A , будь то x , или p_y , или любая другая функция координат и импульса, описывается матрицей в базисе $\mathbf{B}(0)$. *Элементы этой матрицы не зависят от времени.* Однако *вероятность* получить при измерении, проводимом в момент t , определенные результаты *зависит от времени*, так как вектор состояния $\psi(t)$ в шредингеровском представлении является функцией времени.

Гейзенберговское представление. В этом представлении зависящая от времени прежняя амплитуда («вектор») состояния $\psi(t)$, связанная со своим начальным значением через $\hat{S}$ -матрицу соотношением

$$\psi(t) = \hat{S}(t)\psi(0), \quad (19.9)$$

задается в *зависящем от времени базисе* $\mathbf{B}(t)$ векторов:

$$e^{(s)}(t) = \hat{S}(t)e^{(s)}(0). \quad (19.10)$$

Компоненты «вектора» $\psi(t)$ в базисе $\mathbf{B}(t)$ не зависят от времени и равны компонентам «вектора» $\psi(0)$ в базисе $\mathbf{B}(0)$, так как выполняются соотношения

$$\begin{aligned} e^{+(s)}(t)\psi(t) &= [\hat{S}(t)e^{(s)}(0)]^+ \hat{S}(t)\psi(0) = \\ &= e^{+(s)}(0)\hat{S}^+ \hat{S}\psi(0) = e^{+(s)}(0)\psi(0). \end{aligned} \quad (19.11)$$

Содержание этих соотношений иногда кратко выражают в форме утверждения, что вектор состояния не зависит от времени. Однако лучше говорить, что вектор состояния оказывается отнесенным к сопутствующей ему системе координат и представляется постоянным лишь в этой системе.

Матричные элементы наблюдаемой A — функции координат и импульса, не содержащей явной зависимости от времени, постоянны во времени лишь при рассмотрении их в базисе $\mathbf{B}(0)$, *но не* в гейзенберговском базисе $\mathbf{B}(t)$, зависящем от времени.

Гейзенберговское уравнение движения. Соответствующая оператору $\hat{A}$ матрица при переходе от $t = 0$ к моменту времени t принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{A}(t) &= \hat{S}^+(t)\hat{A}\hat{S}(t), \\ \hat{A} &= \hat{S}\hat{A}(t)\hat{S}^+. \end{aligned} \quad (19.12)$$

где $\hat{A}$ — не зависящая от времени матрица, описывающая наблюдаемую в шредингеровском базисе $\mathbf{B}(0)$. Найдем производную по времени от $\hat{A}(t)$, используя уравнения (19.76):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{A}(t) &= \hat{S}^+(t)\hat{A}\hat{S}(t) + \hat{S}^+(t)\hat{A}\hat{S}(t) = \\ &= \frac{i}{\hbar}[\hat{S}^+ \hat{H} \hat{A} \hat{S} - \hat{S}^+ \hat{A} \hat{H} \hat{S}]. \end{aligned}$$

Приняв, как и в (19.12),

$$\hat{H}(t) = \hat{S}^+ \hat{H} \hat{S}, \quad (19.13)$$

получим:

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{A}(t)]. \quad (19.14)$$

Это *гейзенберговское уравнение движения* для операторов, не зависящих явно от времени. Смысл $\hat{A}(t)$ можно понять, заметив, что среднее значение $\hat{A}(t)$, взятое по состоянию $\psi(0)$ в момент времени $t = 0$, равно среднему значению $\hat{A}$ по состоянию $\psi(t)$ в момент времени t .

Уравнение (19.14) обнаруживает явное сходство с соответствующим уравнением классической механики, в котором фигурируют скобки Пуассона. Поэтому коммутатор в правой части (19.14) обычно называют *квантовыми скобками Пуассона* от $\hat{H}$ и $\hat{A}$ (см. также последние уравнения этой лекции).

Если гамильтониан $\hat{H}$ не содержит явной зависимости от t , то из (19.14) следует, что

$$\frac{d\hat{H}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{H}(t)] \equiv 0, \quad (19.14')$$

т. е. что

$$H(t) = \text{const} = H(0) = H. \quad (19.15)$$

Это, однако, верно лишь *при условии*, что гамильтониан *не зависит явно* от времени.

Связь между (19.14) и уравнением Гамильтона.

Положим, что гамильтониан $H = H(q_1, q_2, q_3, \dots, p_1, p_2, p_3, \dots)$ явно не зависит от времени. Перестановочные соотношения $[\hat{p}_s, \hat{q}_s] = \hbar/i$ в простых случаях приводят к уравнениям

$$[\hat{H}, \hat{q}_s] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial p_s}, \quad [\hat{H}, \hat{p}_s] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial q_s}. \quad (19.16)$$

Отсюда с учетом (19.14) получим уравнения

$$\begin{aligned} \frac{dq_s}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{q}_s] = \frac{\partial H}{\partial p_s}, \\ \frac{dp_s}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_s] = -\frac{\partial H}{\partial q_s}, \end{aligned}$$

которые являются уравнениями Гамильтона, имеющими ту же характерную форму, что и соответствующие уравнения классической механики.

Лекция 20

Законы сохранения и сохраняющиеся величины

В этой лекции будет предполагаться, что гамильтониан $\hat{H}$ не зависит явным образом от времени t . (20.1)

То же предположение примем относительно других операторов $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$. (20.2)
Согласно (19.15), в рассматриваемом случае

$$H = \text{const.} \quad (20.3)$$

Это закон сохранения энергии.

Аналогичным образом из (19.14) следует, что физическая величина A сохраняется, если (20.4)

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0.$$

Это равенство означает, что измерение A в данный или любой последующий момент времени дает *один и тот же результат*.

Преобразования симметрии. Классические законы сохранения импульса и момента связаны со свойствами симметрии физического пространства, именно:

сохранение импульса — с симметрией относительно трансляций (сдвигов) системы координат*;

сохранение момента импульса — с симметрией относительно поворотов системы координат.

Обратно, из наличия законов сохранения можно сделать заключение о свойствах симметрии системы. В связи со сказанным полезно ввести *преобразования симметрии* для физических систем.

Примеры преобразований симметрии:

1. Преобразование трансляции (сдвиг) координат (симметрия имеет место лишь в случае чисто внутренних сил).

2. Преобразование ротации (поворот) координат (симметрия имеет место лишь в случае чисто внутренних сил или в случае центральных внешних сил, если поворот совершается вокруг источника сил).

3. Поворот вокруг выделенной оси z (аксиальная симметрия также требует определенных условий).

4. Отражение относительно плоскости симметрии.

В каждом из этих случаев можно ввести оператор $\hat{T}$, определяемый равенством

$$\hat{T}f \text{ (в исходном положении)} = f \text{ (в положении, измененном действием преобразования симметрии).} \quad (20.5)$$

ПРИМЕР. Отражение относительно плоскости xu для функции двух частиц:

$$\hat{T}f(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2) = f(x_1, y_1, -z_1; x_2, y_2, -z_2).$$

$$\begin{array}{l} \textbf{Теорема. Оператор преобразования симметрии } \hat{T} \text{ является унитарным:} \\ \hat{T}^+ \hat{T} = 1. \end{array} \quad (20.6)$$

Доказательство самоочевидно, так как $\hat{T}$ явно сохраняет нормировку волновой функции f .

$$\begin{array}{l} \textbf{Теорема. Оператор преобразования симметрии } \hat{T} \text{ коммутирует с гамильтонианом } H: \\ [\hat{H}, \hat{T}] = 0. \end{array} \quad (20.7)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

При рассмотрении одного собственного значения E_r оператора $\hat{H}$, определяющего вектор подпространства (одной или более) собственных функций гамильтониана $\hat{H}$, соответствующих этому значению E_r , заметим, что оператор действует *внутри* этого подпространства. Это означает, что матричные элементы T_{rs} оператора $\hat{T}$ в представлении Гейзенберга равны нулю при $E_r \neq E_s$, что эквивалентно утверждению теоремы.

Теорема. Эрмитово сопряженный оператор преобразования симметрии $\hat{T}^+$ коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$:

$$[\hat{H}, \hat{T}^+] = 0. \quad (20.8)$$

Доказательство сводится к тому соображению, что $\hat{T}^+ = \hat{T}^{-1}$ представляет собой также преобразование симметрии (обратное преобразованию $\hat{T}$).

Теорема. Собственные функции унитарной матрицы преобразования симметрии $\hat{T}$ ортогональны (подобно собственным функциям эрмитовой матрицы), а модули их собственных значений равны единице.

Доказательство.

$$\hat{T} = \frac{\hat{T} + \hat{T}^+}{2} + i \frac{\hat{T} - \hat{T}^+}{2i} = \hat{A} + i\hat{B}.$$

Матрицы A и B эрмитовы и коммутируют друг с другом; следовательно, они имеют общую систему собственных функций, причем эти функции ортогональны. Очевидно, эти же функции являются собственными функциями оператора $\hat{T}$ (первая часть теоремы доказана). Возьмем теперь собственные векторы этих функций в качестве базиса и приведем матрицу $\hat{T}$ к диагональному виду. Тогда из равенства $\hat{T}\hat{T}^+ = 1$ следует, что диагональные элементы исследуемой матрицы по модулю равны единице (тем самым доказана и вторая часть теоремы). Таким образом,

$$\begin{aligned} \text{Собственные значения оператора } \hat{T} &\text{ равны } e^{i\alpha_s}. \\ \text{Собственные значения оператора } \hat{T}^+ &\text{ равны } e^{-i\alpha_s}. \\ \text{Собственные значения оператора } \hat{A} &\text{ равны } \cos \alpha_s. \\ \text{Собственные значения оператора } \hat{B} &\text{ равны } \sin \alpha_s, \\ &\text{где числа } \alpha_s \text{ — действительные.} \end{aligned} \quad (20.9)$$

Все четыре собственных значения соответствуют одной и той же волновой функции $\psi^{(s)}$.

Все четыре матрицы (20.9) коммутируют друг с другом и с гамильтонианом $\hat{H}$. Следовательно, они не меняются во времени, а их собственные функции $\psi^{(s)}$ могут быть выбраны так, что совпадут с собственными функциями оператора энергии (гамильтониана). (20.10)

Определения. Группой* симметрии называется совокупность всех преобразований, соответствующих определенному свойству симметрии. Например, все повороты вокруг осей x, y, z образуют группу вращений.

Представлением группы называется совокупность унитарных матриц, соответствующих всем преобразованиям группы и обладающих общей алгеброй. (20.11)

Неприводимым представлением называется такое представление, все матрицы которого не могут быть одновременно приведены к виду

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \text{штриховка} & 0 \\ \hline 0 & \text{штриховка} \\ \hline \end{array}$$

(20.12)

Свойства. Неприводимые представления однозначно определяются абстрактной структурой группы. (20.13)

Полезный прием состоит в том, чтобы выбрать такую систему базисных векторов

$$\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots,$$

что она распадается на подсистемы

$$\varphi^{(l_1)}, \varphi^{(l_2)}, \varphi^{(l_3)}, \dots, \varphi^{(l_g)}, \quad (20.14)$$

каждая из которых (система l) под действием всех преобразований группы симметрии переходит сама в себя. Такое разделение на подсистемы, не зацепляющиеся друг за друга при преобразованиях, соответствует явному нахождению неприводимых представлений рассматриваемой группы R_l .

Теорема (Вигнера). Если величина $\hat{A}$ (например, гамильтониан H) коммутирует со всеми преобразованиями группы, то матричные элементы $\varphi^{+(i)} \hat{A} \varphi^{(k)}$ при выборе базисных векторов (20.14) равны нулю, коль скоро векторы $\varphi^{(i)}$ и $\varphi^{(k)}$ соответствуют различным неприводимым представлениям. Иначе говоря, (20.15)

$$\langle \varphi^{(li)} | \hat{A} | \varphi^{(\lambda k)} \rangle = a_{l,\lambda} \delta_{ik},$$

где $a_{l,\lambda}$ — число, причем $R_l = R_\lambda$.

Приложение 1 (Трансляционная симметрия и закон сохранения импульса). Для замкнутой системы (действуют лишь внутренние силы, что означает однородность физического пространства) имеет место симметрия относительно сдвига (трансляции), описываемого преобразованием

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = \hat{T}(a, b, c) = \text{Сдвиг всех координат на } \mathbf{a} \quad (20.16)$$

$$[\mathbf{a} \equiv (a, b, c)].$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Все операторы $\hat{T}$, соответствующие различным векторам (сдвигам) $\mathbf{a}$, $\mathbf{a}'$ и т. д., коммутируют между собой, а также, конечно, и с гамильтонианом $\hat{H}$ (образуя тем самым так называемую *абелеву группу*). Именно поэтому целесообразно выбрать такое представление, в котором $\hat{H}$ и все $\hat{T}$ описываются диагональными матрицами. Тогда, обозначая волновую функцию через ψ , можно записать

$$\hat{T}(\mathbf{a})\psi = e^{i\alpha(\mathbf{a})}\psi \quad [\alpha = \alpha(\mathbf{a}) \text{ — функция вектора } \mathbf{a}].$$

На основании $\hat{T}(\mathbf{a})\hat{T}(\mathbf{a}') = \hat{T}(\mathbf{a} + \mathbf{a}')$ заключаем, что

$$\alpha(\mathbf{a}) + \alpha(\mathbf{a}') = \alpha(\mathbf{a} + \mathbf{a}') \quad (20.17)$$

т.е. $\alpha = \mathbf{k} \cdot \mathbf{a} = k_x a + k_y b + k_z c$,

где $\mathbf{k}$ — постоянный для данной волновой функции ψ вектор. Для другой волновой функции вектор $\mathbf{k}$ — другой. Отсюда

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} \text{ — неприводимое представление} \quad (20.18)$$

группы трансляций.

$$\textbf{Вывод. Величина } \hbar \mathbf{k} \text{ есть импульс системы.} \quad (20.19)$$

Доказательство.

Возьмем бесконечно малый сдвиг вдоль оси x ($a = \varepsilon$, $b = c = 0$); тогда

$$\hat{T} = e^{ik_x \varepsilon} \approx 1 + ik_x \varepsilon$$

и

$$\hat{T}\psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots) \approx (1 + k_x \varepsilon)\psi = \psi + ik_x \varepsilon \psi;$$

с другой стороны,

$$\begin{aligned} \hat{T}\psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots) &= \\ &= \psi(x_1 + \varepsilon, y_1, z_1; x_2 + \varepsilon, y_2, z_2; \dots) \approx \psi + \varepsilon \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \dots \right). \end{aligned}$$

Сравнивая эти выражения, находим:

$$k_x \psi = \frac{1}{i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \dots \right) = \frac{1}{\hbar} (p_x^{(1)} \psi + p_x^{(2)} \psi + \dots),$$

$$\text{откуда } \hbar k_x = \sum_s p_x^{(s)} \text{ или } \hbar k = \sum_s p^{(s)}.$$
(20.20)

Здесь суммирование проводится по всем материальным точкам.

Волновые функции, зависящие от $\mathbf{p}$, имеют вид

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_1} \varphi(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1, \dots);$$
(20.21)

$\mathbf{p}$ — вектор, компоненты которого есть *числа*, а не операторы; эти компоненты — *собственные значения* операторов $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ и $\hat{p}_z$.

Часто используются преобразования к движущейся системе отсчета (преобразование Галилея или преобразование Лоренца); например, чтобы перейти к системе центра масс (центра инерции). В такой системе отсчета

$$\mathbf{p} = 0 \text{ и волновая функция } \psi \text{ зависит только от относительных координат материальных точек}^1.$$
(20.22)

Системы центра масс важны и с более общей точки зрения*.

Приложение 2 (Симметрия относительно поворотов и закон сохранения момента импульса). Рассматриваемый случай реализуется, когда на систему действуют только внутренние силы (замкнутая система) или когда внешние силы обладают центральной симметрией. В последнем случае центр вращения должен совпадать с источником внешних (центральных) сил. Пусть

$\hat{T}$ — оператор поворота на бесконечно малый угол ω_z вокруг оси z ; этот оператор дает преобразование

$$x \rightarrow x - \omega_z y, \quad y \rightarrow y + \omega_z x, \quad z \rightarrow z,$$

так что

$$\hat{T} \psi(x_1, y_1, z_1, \dots) = \psi(x_1 - \omega_z y_1, y_1 + \omega_z x_1, z_1, \dots).$$
(20.23)

Образует эрмитов оператор

$$\hat{M}_z = \frac{\hbar}{\omega_z} \frac{\hat{T} - \hat{T}^+}{2i}.$$

¹Конечно, если систему можно считать изолированной. — *Прим. ред.*

Аналогичным образом можно построить эрмитовы операторы $\widehat{M}_x$, $\widehat{M}_y$ и оператор

$$\widehat{\mathbf{M}}^2 = \widehat{M}_x^2 + \widehat{M}_y^2 + \widehat{M}_z^2. \quad (20.24)$$

Следовательно,

Физические величины (наблюдаемые) $M_x, M_y, M_z, \mathbf{M}^2$ являются константами движения. (20.25)

Это закон сохранения момента импульса.

Из определения операторов (20.25) следуют также перестановочные соотношения:

$$[\widehat{M}_x, \widehat{M}_y] = \frac{\hbar}{i} \widehat{M}_z, \quad [\widehat{M}_y, \widehat{M}_z] = \frac{\hbar}{i} \widehat{M}_x, \quad [\widehat{M}_z, \widehat{M}_x] = \frac{\hbar}{i} \widehat{M}_y, \quad (20.26)$$

т. е.

$$[\widehat{\mathbf{M}} \times \widehat{\mathbf{M}}] = \frac{\hbar}{i} \widehat{\mathbf{M}},$$

$$[\widehat{M}_x, \widehat{\mathbf{M}}^2] = [\widehat{M}_y, \widehat{\mathbf{M}}^2] = [\widehat{M}_z, \widehat{\mathbf{M}}^2] = 0.$$

Полученные для системы частиц перестановочные соотношения имеют в точности тот же вид, что и соотношения для одиночной материальной точки (18.1)–(18.3).

Можно показать, что матричная структура (20.15), отраженная в серии равенств (18.12)–(18.14), (18.17) и (18.18), следует только из перестановочных соотношений, и тем самым доказать в общем случае теорему (20.15), но со следующим *важным отличием*: в лекции 18 было показано, что орбитальное квантовое число l принимает целые значения; в общем случае, однако, оказываются допустимыми также *полуцелые* $[(2n+1)/2]$ значения l . Последнее обстоятельство особенно важно в квантовой теории спина.

Например, преобразование $T(\alpha)$, соответствующее повороту на угол α вокруг некоторой оси z , при действии на свою собственную функцию дает

$$T(\alpha)\psi = e^{im\alpha}\psi; \quad (20.27)$$

если использовать представление, в котором матрицы M_z и $\mathbf{M}^2$ диагональны, то m будет целым или полуцелым числом.

Приложение 3 (Симметрия относительно отражения (инверсии) и закон сохранения четности). Если в физической системе действуют лишь внутренние и центральные внешние силы, то можно постулировать существование симметрии относительно отражения (инверсии) координат. В этом случае преобразование $\hat{T}$ соответствует замене

$$x \rightarrow -x, \quad y \rightarrow -y, \quad z \rightarrow -z$$

и представляет собой отражение относительно начала координат. (Источник центральных сил, как обычно, помещается в начале координат.)

Условие симметрии относительно отражения физически означает эквивалентность правой и левой систем координат.

Из данного определения $\hat{T}$ следует, что

$$\hat{T}\psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots) = \psi(-x_1, -y_1, -z_1; -x_2, -y_2, -z_2; \dots). \quad (20.28)$$

Свойства преобразования инверсии. Нетрудно видеть (применив преобразование $\hat{T}$ дважды), что

$$\hat{T}^2 = 1. \quad (20.29)$$

Кроме того, оператор инверсии координат $\hat{T}$ коммутирует с операторами (20.25) и, конечно, с гамильтонианом $\hat{H}$.

$$\left. \begin{array}{l} \text{За основу обычно берут собственные функции опера-} \\ \text{торов } \hat{M}^2, \hat{M}_z \text{ и } \hat{T} \end{array} \right| \quad (20.30)$$

(все они коммутируют между собой). Из равенства (20.29) следует, что собственные значения оператора инверсии $\hat{T}$ [в общем случае даваемые формулой (20.9)] равны

$$\text{Собственные значения } \hat{T} = \pm 1. \quad (20.31)$$

Это обстоятельство позволяет ввести следующую классификацию состояний физических систем:

Состояние

$$\begin{array}{ll} \text{четное} & \text{— при } T = +1 \text{ (положительная четность);} \\ \text{нечетное} & \text{— при } T = -1 \text{ (отрицательная четность).} \end{array} \quad (20.32)$$

Четность есть свойство системы, сохраняющееся пока и поскольку на систему действуют только центральные внешние силы и произвольные внутренние силы¹.

¹С того времени, как Э.Ферми читал эти лекции, было открыто несохранение четности при слабых взаимодействиях. См. основные работы в сборнике «Новые свойства элементарных частиц», ИЛ, 1957. — *Прим. ред.*

Лекция 21

Стационарная теория возмущений. Метод Ритца

Первый шаг теории возмущений — представление оператора Гамильтона системы и форме

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{\mathcal{H}}, \quad (21.1)$$

где $\widehat{\mathcal{H}}$ — малая, не зависящая явно от времени добавка (*возмущение*) к невозмущенному оператору $\widehat{H}_0$. Собственные значения и собственные функции невозмущенного гамильтониана $\widehat{H}_0$ определяются из уравнения

$$\widehat{H}_0 u_0^{(n)} = E_0^{(n)} u_0^{(n)}, \quad (21.2)$$

где $u_0^{(n)}$ — собственные функции гамильтониана $\widehat{H}_0$ (ортонормированные). Из соображений удобства будем писать в дальнейшем

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \lambda \widehat{\mathcal{H}}, \quad (21.3)$$

где постоянная λ считается малой; этот прием позволит более наглядно разделить уравнения различных приближений, причем в конечном результате $\lambda \rightarrow 1$. Разложим собственные функции и собственные значения полного гамильтониана $\widehat{H}$ в ряд по степеням λ :

$$u^{(n)} = u_0^{(n)} + \lambda u_1^{(n)} + \lambda^2 u_2^{(n)} + \dots; \quad (21.4)$$

$$E^{(n)} = E_0^{(n)} + \lambda E_1^{(n)} + \lambda^2 E_2^{(n)} + \dots; \quad (21.5)$$

тогда уравнение для собственных функций $u^{(n)}$ и собственных значений $E^{(n)}$ полного гамильтониана

$$(\widehat{H}_0 + \lambda \widehat{\mathcal{H}}) u^{(n)} = E^{(n)} u^{(n)} \quad (21.6)$$

примет вид

$$\begin{aligned} (\widehat{H}_0 + \lambda \widehat{\mathcal{H}})(u_0^{(n)} + \lambda u_1^{(n)} + \dots) = \\ = (E_0^{(n)} + \lambda E_1^{(n)} + \dots)(u_0^{(n)} + \lambda u_1^{(n)} + \dots) \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \widehat{H}_0 u_0^{(n)} + \lambda(\widehat{H}_0 u_1^{(n)} + \widehat{\mathcal{H}} u_0^{(n)}) + \lambda^2(\widehat{H}_0 u_2^{(n)} + \widehat{\mathcal{H}} u_1^{(n)}) + \dots = \\ = E_0^{(n)} u_0^{(n)} + \lambda(E_0^{(n)} u_1^{(n)} + E_1^{(n)} u_0^{(n)}) + \\ + \lambda^2(E_0^{(n)} u_2^{(n)} + E_1^{(n)} u_1^{(n)} + E_2^{(n)} u_0^{(n)}) + \dots \end{aligned}$$

Приравнявая коэффициенты при λ в соответствующих степенях, получаем систему уравнений

$$\widehat{H}_0 u_0^{(n)} = E_0^{(n)} u_0^{(n)}, \quad (21.7)$$

$$\widehat{H}_0 u_1^{(n)} - E_0^{(n)} u_1^{(n)} - E_1^{(n)} u_0^{(n)} = -\widehat{\mathcal{H}} u_0^{(n)}, \quad (21.8)$$

$$\widehat{H}_0 u_2^{(n)} - E_0^{(n)} u_2^{(n)} - E_2^{(n)} u_0^{(n)} = -\widehat{\mathcal{H}} u_1^{(n)} + E_1^{(n)} u_1^{(n)}, \quad (21.9)$$

.....

[Уравнение (21.7) совпадает с уравнением (21.2) и тем самым подтверждает его.]

Разложим функции $u_i^{(n)}$ в ряд по собственным функциям $u_0^{(n)}$:

$$\begin{aligned} u_1^{(n)} &= \sum'_m C_{nm}^{(1)} u_0^{(m)}, \\ u_2^{(n)} &= \sum'_m C_{nm}^{(2)} u_0^{(m)}, \end{aligned} \quad (21.10)$$

.....

Штрих в суммах означает, что суммирование ведется по всем значениям m , кроме значения $m = n$.

Подставив эти разложения в (20.8) и (20.9) и, используя (21.2) или (21.7), получим:

$$\sum_m' C_{nm}^{(1)}(E_0^{(m)} - E_0^{(n)})u_0^{(m)} - E_0^{(n)}u_0^{(n)} = -\widehat{\mathcal{H}}u_0^{(n)}, \quad (21.11)$$

$$\sum_m' C_{nm}^{(2)}(E_0^{(m)} - E_0^{(n)})u_0^{(m)} - E_1^{(n)}u_0^{(n)} = -\widehat{\mathcal{H}}u_1^{(n)} + E_1^{(n)}u_1^{(n)}, \quad (21.12)$$

.....

Матричный элемент возмущающей добавки $\mathcal{H}_{mn}$ равен

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mn} &= (u_0^{(m)} | \widehat{\mathcal{H}} u_0^{(n)}) \equiv \langle m | \widehat{\mathcal{H}} | n \rangle = \\ &= \int u_0^{(m)*} \widehat{\mathcal{H}} u_0^{(n)} dx = u_0^{+(m)} \widehat{\mathcal{H}} u_0^{(n)}. \end{aligned} \quad (21.13)$$

Найдем добавку первого порядка к энергии $E_1^{(n)}$; для этого умножим уравнение (21.11) слева на $u_0^{+(n)}$ и, используя свойство ортогональности системы функций нулевого приближения

$$u_0^{+(n)} u_0^{(m)} = \delta_{nm}, \quad (21.14)$$

получим

$$E_1^{(n)} = u_0^{+(n)} \widehat{\mathcal{H}} u_0^{(n)} = \mathcal{H}_{nn}. \quad (21.15)$$

Вывод. Член первого порядка теории возмущений для собственных значений энергии равняется *среднему значению оператора $\widehat{\mathcal{H}}$ по функциям невозмущенного состояния.*

Далее, умножая (21.11) слева на $u_0^{+(m)}$, получим выражения для коэффициентов разложения

$$C_{nm}^{(1)} = \frac{\mathcal{H}_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}}; \quad (21.16)$$

отсюда *собственные функции первого приближения* равны

$$u_0^{(n)} + \sum_m' \frac{\mathcal{H}_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} u_0^{(m)}. \quad (21.17)$$

Аналогичным образом из уравнения (21.12) получим:

$$E_2^{(n)} = \sum'_m \frac{\mathcal{H}_{nm}\mathcal{H}_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} = \sum'_m \frac{|\mathcal{H}_{nm}|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}}; \quad (21.18)$$

$$C_{nm}^{(2)} = \sum'_s \frac{\mathcal{H}_{ms}\mathcal{H}_{sn}}{(E_0^{(n)} - E_0^{(s)})(E_0^{(n)} - E_0^{(m)})} - \frac{\mathcal{H}_{mn}\mathcal{H}_{nn}}{(E_0^{(n)} - E_0^{(m)})^2}. \quad (21.19)$$

ПРИМЕР 3 (ЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР, ВОЗМУЩАЕМЫЙ ПОСТОЯННОЙ СИЛОЙ F). Возмущение гамильтониана имеет вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = -F\widehat{x}. \quad (21.20)$$

Матричные элементы $\widehat{\mathcal{H}}$ равны

$$\mathcal{H}_{nm} = -Fx_{nm};$$

согласно соотношениям (17.23) записываем:

$$x_{n,n+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1}, \quad x_{n,n-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n},$$

$$E_0^{(n)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (21.21)$$

$$\dots = x_{n,n-3} = x_{n,n-2} = x_{nn} = x_{n,n+2} = x_{n,n+3} = \dots = 0.$$

Итак, в первом порядке теории возмущений поправка для энергии равна нулю:

$$E_1^{(n)} = \mathcal{H}_{nn} = -Fx_{nn} = 0. \quad (21.22)$$

Во втором порядке

$$E_2^{(n)} = \sum'_m \frac{|\mathcal{H}_{nm}|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} = F^2 \left(\frac{|x_{n,n+1}|^2}{-\hbar\omega} + \frac{|x_{n,n-1}|^2}{\hbar\omega} \right) =$$

$$= \frac{F^2}{\hbar\omega} \left(-\frac{\hbar}{2m\omega}(n+1) + \frac{\hbar}{2m\omega}n \right) = -\frac{F^2}{2m\omega^2}. \quad (21.23)$$

Таким образом, энергии всех состояний уменьшаются по сравнению с невозмущенными значениями на величину $F^2/2m\omega^2$.

Проведем непосредственную проверку полученного результата. Для этого произведем тождественное преобразование полного гамильтониана:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 - Fx \equiv \\ &\equiv \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}\left(x - \frac{F}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{F^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \quad (21.24)$$

Этот гамильтониан отличается от невозмущенного лишь смещением положения равновесия (координаты x) на величину $F/m\omega^2$, не изменяющим величины энергии, и добавочным постоянным слагаемым $-F^2/2m\omega^2$, представляющим собой уже полученную поправку.

ПРИМЕР 4 (ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА ДЛЯ ЧАСТИЦ СО СПИНОМ НУЛЬ). В качестве невозмущенной системы рассматривается заряженная бесспиновая частица, движущаяся в кулоновском центральном поле (см. лекцию 8, где также не учитывался спин электрона). Чтобы учесть в волновом уравнении взаимодействие с внешним магнитным полем, используется обычная замена $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, где $\mathbf{A}$ — электромагнитный вектор-потенциал (магнитная индукция $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$). При этом полный гамильтониан принимает вид

$$H = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + U(r) = \frac{1}{2M}p^2 - \frac{e}{2Mc}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + U(r) + \frac{e^2}{c^2}\mathbf{A}^2. \quad (21.25)$$

(Членом, квадратичным по $\mathbf{A}$, в дальнейшем пренебрегаем*.)

Коммутатор $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}(\nabla \cdot \mathbf{A})$ в статическом случае равен нулю. Пусть вектор индукции магнитного поля $\mathbf{B}$ будет параллелен оси z , так что

$$A_x = -\frac{B}{2}y, \quad A_y = -\frac{B}{2}x, \quad A_z = 0. \quad (21.26)$$

Тогда

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 + U(r) - \frac{eB}{4Mc}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x), \quad (21.27)$$

где, очевидно,

$$\frac{1}{2M}\hat{p}^2 + U(r) = \hat{H}_0, \quad -\frac{eB}{4Mc}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = \hat{\mathcal{H}}.$$

Собственные функции невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0$, как было установлено в лекции 8, имеют вид

$$u_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (21.28)$$

В этом случае расчет по теории возмущений осуществляется тривиально, так как собственные функции (21.28) одновременно являются и собственными функциями гамильтониана (21.27). Получим

$$\hat{H}_0 u_{nlm} = E_{nl}^{(0)} u_{nlm},$$

$$\hat{\mathcal{H}} u_{nlm} =$$

$$= -\frac{eB}{4Mc} (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) u_{nlm} =$$

$$= -\frac{eB}{4Mc} M_z u_{nlm} =$$

$$= -\frac{eB}{4Mc} m u_{nlm},$$

так что

$$E_{nlm} = E_{nl}^{(0)} - \frac{eB}{4Mc} m.$$

(21.29)

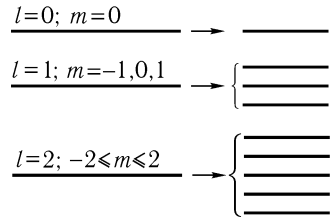


Рис. 12. Эффект Зеемана без учета спина электрона при различных значениях орбитального квантового числа l

Из (21.19) видно, что в результате наложения внешнего магнитного поля вырождение по m снимается и энергетические уровни атома водорода расщепляются (это расщепление показано на рис. 12). Напомним, что спин электрона здесь не учитывался.

Темы для обсуждения:

1. Правила отбора* $m \begin{cases} \nearrow m \pm 1 \\ \searrow m \end{cases}$ и принцип соответствия.

2. Роль констант движения в предельной форме невозмущенных собственных функций, входящих в суммы теории возмущений.

Магнетон Бора. Запишем возмущающий гамильтониан в форме энергии взаимодействия орбитального магнитного момента с внешним

магнитным полем, т. е. подставим в выражение (21.27) в качестве $\mathcal{H}$ величину

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -\mathbf{B}\boldsymbol{\mu}, \\ \boldsymbol{\mu} &= \frac{e\hbar}{2mc} \left(\frac{1}{\hbar} \mathbf{M} \right),\end{aligned}\tag{21.30}$$

где $\boldsymbol{\mu}$ — орбитальный магнитный момент, а $\mathbf{M}/\hbar$ — орбитальный механический момент, выраженный в единицах действия $\hbar$.

Интерпретация. Каждой единице $\hbar$ орбитального момента соответствует единица магнитного момента

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} = 9,2732 \cdot 10^{-21} \text{ см}^{5/2} \cdot \text{г}^{1/2} \cdot \text{сек}^{-1}.\tag{21.31}$$

«Квант» магнитного момента μ_0 называют *магнетоном Бора*.

Темы для обсуждения:

1. Доказательство формулы (21.31), исходя из классических представлений о движении электрона по непрерывной орбите.

2. Доказательство формулы (21.31) с помощью представления о плотности тока. Плотность тока $\mathbf{j}$, как следует из уравнения непрерывности (2.7) и определения (2.9), есть

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar e}{2imc} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*).\tag{21.32}$$

Кроме того, учтем, что

$$\begin{aligned}\mu_z &= \int \frac{1}{2} (\mathbf{x} \times \mathbf{j})_z d^3x, \\ \psi &= F(r, \theta) e^{im\varphi}, \quad \psi^* = F(r, \theta) e^{-im\varphi}, \\ \int |\psi|^2 d^3x &= 1.\end{aligned}\tag{21.33}$$

Отсюда без труда получим:

$$\mu_z = \frac{e\hbar}{2m_e c} m.\tag{21.34}$$

магнитным полем, т. е. подставим в выражение (21.27) в качестве $\mathcal{H}$ величину

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -\mathbf{B}\boldsymbol{\mu}, \\ \boldsymbol{\mu} &= \frac{e\hbar}{2mc} \left(\frac{1}{\hbar} \mathbf{M} \right),\end{aligned}\tag{21.30}$$

где $\boldsymbol{\mu}$ — орбитальный магнитный момент, а $\mathbf{M}/\hbar$ — орбитальный механический момент, выраженный в единицах действия $\hbar$.

Интерпретация. Каждой единице $\hbar$ орбитального момента соответствует единица магнитного момента

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} = 9,2732 \cdot 10^{-21} \text{ см}^{5/2} \cdot \text{г}^{1/2} \cdot \text{сек}^{-1}.\tag{21.31}$$

«Квант» магнитного момента μ_0 называют *магнетоном Бора*.

Темы для обсуждения:

1. Доказательство формулы (21.31), исходя из классических представлений о движении электрона по непрерывной орбите.

2. Доказательство формулы (21.31) с помощью представления о плотности тока. Плотность тока $\mathbf{j}$, как следует из уравнения непрерывности (2.7) и определения (2.9), есть

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar e}{2imc} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*).\tag{21.32}$$

Кроме того, учтем, что

$$\begin{aligned}\mu_z &= \int \frac{1}{2} (\mathbf{x} \times \mathbf{j})_z d^3x, \\ \psi &= F(r, \theta) e^{im\varphi}, \quad \psi^* = F(r, \theta) e^{-im\varphi}, \\ \int |\psi|^2 d^3x &= 1.\end{aligned}\tag{21.33}$$

Отсюда без труда получим:

$$\mu_z = \frac{e\hbar}{2m_e c} m.\tag{21.34}$$

Практическое приложение теоремы (метод Ритца): выберем разумную пробную волновую функцию $\psi^0 \approx f(x, \alpha, \beta, \dots)$, где $\alpha, \beta, \dots$ — подлежащие варьированию (подгоночные) параметры. Вычислив величину

$$E(\alpha, \beta, \dots) = \frac{\int f^*(x, \alpha, \beta, \dots) H f(x, \alpha, \beta, \dots) dx}{\int f^*(x, \alpha, \beta, \dots) f(x, \alpha, \beta, \dots) dx}, \quad (21.39)$$

найдем такие значения параметров $\alpha, \beta, \dots$, при которых

$$E(\alpha, \beta, \dots) = \min. \quad (21.40)$$

Это минимальное значение E будет близко к низшему энергетическому уровню, если пробная функция $f(x, \alpha, \beta, \dots)$ является хорошим приближением к точной собственной функции, соответствующей этому уровню.

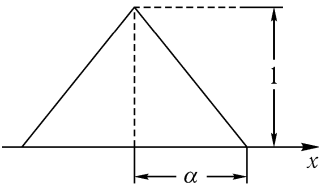


Рис. 13. Вид пробной функции $f(x)$

ПРИМЕР. Рассмотрим задачу о гармоническом осцилляторе с точки зрения метода Ритца. Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} \hat{x}^2 \quad (21.41)$$

(здесь приняты единицы $\hbar = 1$, $m = 1$, $\omega = 1$).

Обозначим пробную волновую функцию через $f(x)$ и зададим ее в форме «треугольника» с высотой 1 и основанием 2α (рис. 13). Здесь всего один варьировемый параметр α . Простые выкладки дают

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \frac{\frac{1}{2} \int_{-\alpha}^{+\alpha} x^2 f^2(x) dx - \frac{1}{2} \int_{-\alpha}^{+\alpha} f(x) f''(x) dx}{\int_{-\alpha}^{+\alpha} f^2(x) dx} = \\ &= \frac{\alpha^3/30 + 1/\alpha}{2/3\alpha} = \frac{1}{20} \alpha^2 + \frac{3}{2} \frac{1}{\alpha^2}. \quad (21.42) \end{aligned}$$

Минимум «энергии» $E(\alpha)$ соответствует значению

$$\alpha = \sqrt[4]{30} = 2,34, \quad (21.43)$$

откуда $E(2,34) = 0,548$;

это с погрешностью не более 10% (достаточно хорошо для первого приближения!) совпадает с точным наименьшим собственным значением, равным 0,500000.

Темы для обсуждения:

1. Доказать следующее утверждение. Величина $E(\alpha, \beta, \dots)$, даваемая формулой (21.29), удовлетворяет неравенству

$$E(\alpha, \beta, \dots) \geq E_0, \quad (21.44)$$

где E_0 — низшее собственное значение энергии рассматриваемой системы.

Указание. Функцию f следует разложить по собственным функциям гамильтониана $\hat{H}$.

2. Обсудить практическое применение доказанного утверждения.

Лекция 22

Случай вырождения и квазивырождения. Эффект Штарка на водороде

Процедура теории возмущений, изложенная в лекции 21, теряет смысл, когда разности

$$E_0^{(n)} - E_0^{(m)} = 0 \text{ (вырождение)}$$

или очень малы (квазивырождение) [см. (21.18) и (21.16)]. В таких случаях необходим другой подход.

Запишем собственные функции невозмущенной системы; пусть

Функции $u_0^{(1)}, u_0^{(2)}, \dots, u_0^{(g)}$ соответствуют вырожденным или квазивырожденным состояниям системы.	Функции $u_0^{(g+1)}, u_0^{(g+2)}, \dots$ соответствуют остальным (невырожденным) состояниям системы.
---	---

(22.1)

Будем искать приближенные решения задачи (в первом порядке) в форме

$$u = \sum_{s=1}^g c_s u_0^{(s)} + \sum_{\alpha=g+1}^{\infty} c_{\alpha} u_0^{(\alpha)}, \quad (22.2)$$

где C_{α} — малые первого порядка, C_s — предположительно велики.

Искомая функция должна приближенно соответствовать гамильтониану $\hat{H}$, заданному, как и раньше, в виде

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

так что уравнение Шредингера имеет вид $\hat{H}u = Eu$, причем

$$E = E_0 + \varepsilon$$

(ε — добавка первого порядка к собственным значениям энергии системы). Подставляя в уравнение Шредингера функцию (22.2), получаем в первом приближении:

$$\sum_{s=1}^g C_s (\hat{H} - E) u_0^{(s)} + \sum_{\alpha=g+1}^{\infty} C_{\alpha} (\hat{H}_0 - E_0) u_0^{(\alpha)} = 0. \quad (22.3a)$$

Но так как, по определению, $u_0^{(\alpha)}$ — собственные функции оператора $\hat{H}_0$, уравнение (22.3a) переписывается в виде

$$\sum_{s=1}^g C_s (\hat{H} - E) u_0^{(s)} + \sum_{\alpha=g+1}^{\infty} C_{\alpha} (E^{(\alpha)} - E_0) u_0^{(\alpha)} = 0. \quad (22.3б)$$

Умножим это уравнение слева на функцию $u_0^{+(l)}$, где $l = 1, 2, \dots, g$; в силу ортонормированности функций нулевого приближения получим:

$$\sum_{s=1}^g C_s (H_{ls} - E) = 0.$$

Это секулярная задача. Условие ее разрешимости —

$$\begin{array}{l} \text{Равенство нулю} \\ \text{детерминанта} \end{array} \left| \begin{array}{cccc} H_{11} - E & H_{12} & \dots & H_{1g} \\ H_{21} & H_{22} - E & \dots & H_{2g} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{g1} & H_{g2} & \dots & H_{gg} - E \end{array} \right| = 0. \quad (22.4)$$

Условие разрешимости представляет собой алгебраическое уравнение степени g для определения энергий E , соответствующих первым g вырожденным или квазивырожденным состояниям невозмущенной системы.

$$\begin{array}{l} \text{Затем находим: } C_{\alpha} = \left(\sum_{s=1}^g C_s H_{\alpha s} \right) / (E_0^{(\alpha)} - E_0), \\ \text{причем знаменатель } (E_0^{(\alpha)} - E_0) \text{ велик!} \end{array} \quad (22.5)$$

Эти коэффициенты дают поправку к волновой функции в первом порядке теории возмущений.

Следует отметить роль законов сохранения при упрощении секулярного уравнения (22.4) в процессе его решения.

Пример. Эффект Штарка. Рассмотрим сдвиг энергетических уровней атома водорода во внешнем электрическом поле напряженности F для уровней с $n = 2$ (эффект Штарка).

Будем считать, что электрическое поле направлено по оси z , так что возмущающий гамильтониан $\mathcal{H}$ (энергия взаимодействия электрона с внешним полем) равен

$$\mathcal{H} = +eFz, \quad (22.6)$$

где F — напряженность электрического поля.

Возмущающий гамильтониан (22.6) является нечетной функцией z . Таким образом, вычисление диагональных элементов $\mathcal{H}_{nn}$ по (21.13) с невозмущенными функциями даст нулевой результат. Отсюда следует, что в основном состоянии атома водорода эффект Штарка в первом порядке отсутствует, так как при $n = 1$ вырождения нет (используется формализм предыдущей лекции); именно поэтому следует рассмотреть следующую оболочку ($n = 2$).

Невозмущенное состояние с главным квантовым числом $n = 2$ четырехкратно вырождено, так что энергии уровней

$$2s_0, 2p_1, 2p_0, 2p_{-1} \quad (22.7)$$

совпадают (см. рис. 7, стр. 42).

Из того факта, что координата z коммутирует с M_z , следует:

$$[\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{M}_z] = 0, \quad (22.8)$$

так что возмущение влияет только на состояния с одинаковым значением магнитного квантового числа m , т. е. на состояния $2s_0$ и $2p_0$ (смешивает их), в то время как два других уровня $2p_1$ и $2p_{-1}$, как и в отсутствие вырождения, сохраняют невозмущенные значения энергии.

В первом приближении добавочную энергию уровня $2p_1$ можно записать [см. (21.15)] в виде

$$E_{2p_1} = \langle 2p_1 | eFz | 2p_1 \rangle = eF \int z |\psi_{2p_1}|^2 d^3x = 0 \quad (22.9)$$

(вследствие нечетности z и четности $|\psi_{2p_1}|^2$). Аналогичный результат получается и для уровня $2p_{-1}$. Следовательно, уровни $2p_1$ и $2p_{-1}$ в первом приближении оказываются невозмущенными. Волновые функции

уровней $2s$ и $2p_0$ имеют вид

$$\psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a}, \quad (22.10)$$

$$\psi_{2p_0} = \frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}} \frac{r}{a} e^{-r/2a} \cos \theta. \quad (22.11)$$

Матричные элементы $\langle 2s|z|2s \rangle$ и $\langle 2p_0|z|2p_0 \rangle$, как и матричный элемент (22.9), равны нулю¹.

Вычислим следующий матричный элемент:

$$\begin{aligned} \langle 2s|z|2p_0 \rangle &= \frac{1}{32\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{a}} \frac{r}{a} r \cos^2 \theta \, 2\pi r^2 \, dr \sin \theta \, d\theta = \\ &= \frac{1}{16a^3} \int_0^\infty \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{a}} r^3 \frac{r}{a} \, dr \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta \, d\theta = \frac{1}{16a^3} [-72a^4] \left[\frac{2}{3}\right] = -3a, \end{aligned} \quad (22.12)$$

где $a = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{1}{z}$ — боровский радиус (8.19).

Матрица, соответствующая возмущающему гамильтониану,

$$eF \begin{vmatrix} 0 & -3a \\ -3a & 0 \end{vmatrix} \quad \text{имеет собственные значения,} \quad (22.13)$$

равные $\pm 3eFa$.

Отсюда следуют энергетические уровни (в первом приближении) и соответствующие волновые функции (в нулевом приближении):

Энергия уровней (первое приближение)	Собственные функции (нулевое приближение)	
$-\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4}$	ψ_{2p_1}	
$-\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4}$	$\psi_{2p_{-1}}$	
$-\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4} + 3eFa$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2s} + \psi_{2p_0})$	
$-\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4} - 3eFa$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2s} - \psi_{2p_0})$	

(22.14)

¹Ср. замечание после формулы (22.6). — *Прим. ред.*

Лекция 23

Нестационарная теория возмущений. Борновское приближение

Пусть гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \widehat{\mathcal{H}}; \quad (23.1)$$

$\hat{H}_0$ — невозмущенный гамильтониан — не зависит от времени, $\widehat{\mathcal{H}}$ — гамильтониан возмущения — может содержать временную зависимость.

Стационарное (невозмущенное) уравнение Шредингера

$$i\hbar\dot{\psi}_0 = \hat{H}_0\psi_0 \quad (23.2)$$

имеет решение

$$\psi_0 = \sum_n a_n^{(0)} u_0^{(n)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_0^{(n)} t}, \quad (23.3)$$

где $a_n^{(0)}$ — постоянные коэффициенты, а $u_0^{(n)}(\mathbf{r})$ — собственные функции уравнения

$$\hat{H}_0 u_0^{(n)} = E_0^{(n)} u_0^{(n)}. \quad (23.4)$$

Требуется найти решение уравнения Шредингера для системы с гамильтонианом $\hat{H}$ (23.1), которое точно мы не можем решить. Для нахождения приближенного решения можно воспользоваться нестационарной теорией возмущений.

Представим решение возмущенного уравнения Шредингера

$$i\hbar\dot{\psi} = (\hat{H}_0 + \widehat{\mathcal{H}})\psi \quad (23.5)$$

в виде

$$\psi = \sum a_n(t) u_0^{(n)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_0^{(n)} t}, \quad (23.6)$$

где $a_n(t)$ — коэффициенты разложения, подлежащие определению. Подставим (23.6) в уравнение (23.5); затем, умножив полученное равенство слева на $u_0^{+(s)}$ и воспользовавшись свойством ортонормированности функций $u_0^{(n)}$ и $u_0^{+(s)}$ и уравнением (23.4), получим:

$$\dot{a}_s = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n \langle s | \widehat{\mathcal{H}} | n \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)}) t}, \quad (23.7)$$

где

$$\langle s | \widehat{\mathcal{H}} | n \rangle = u_0^{+(s)} \widehat{\mathcal{H}} u_0^{(n)} = \int u_0^{*(s)} \widehat{\mathcal{H}} u_0^{(n)} dx = \mathcal{H}_{sn}. \quad (23.8)$$

Система уравнений для a_s (23.7) является точной, а не приближенной, так что фактически она эквивалентна точному уравнению Шредингера (23.5). Будем, однако, решать эти уравнения приближенно, методом итераций: подставим в правую часть (23.7) коэффициенты невозмущенного решения $a_n(0)$ в качестве первого приближения к $a_n(t)$. Приближенное выражение для $a_s(t)$ после интегрирования по времени запишется как

$$a_s(t) \approx a_s(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n a_n(0) \int_0^t \mathcal{H}_{sn}(t) e^{\frac{i}{\hbar} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)}) t} dt. \quad (23.9)$$

Важный частный случай. Пусть при $t = 0$ система находится в состоянии n . Тогда $a_n(0) = 1$, а все другие коэффициенты равны нулю. Отсюда

$$a_s(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_{sn}(t) e^{\frac{i}{\hbar} (E_0^{(s)} - E_0^{(n)}) t} dt \quad \text{при} \quad s \neq n. \quad (23.10)$$

Матричный элемент $\mathcal{H}_{sn}(t)$ определяет переход из состояния n в состояние s .

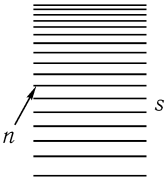
Переходы из состояния n во все прочие состояния вообще.

Положим $\mathcal{H}_{sn}$ не зависящим от времени. Интеграл в (23.10) равен

$$a_s(t) = -\mathcal{H}_{sn} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})t} - 1}{E_0^{(s)} - E_0^{(n)}}.$$

Вероятность перехода за t — время действия возмущения из состояния n в одно состояние s (рис. 14) — равна

$$|a_s(t)|^2 = 4|\mathcal{H}_{sn}|^2 \frac{\sin^2 \frac{t}{2\hbar}(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})}{(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})^2}.$$



Отсюда вероятность перехода во все состояния вообще

$$P(t) = \sum_s |a_s(t)|^2 = 4|\mathcal{H}_{sn}|^2 \sum_s \frac{\sin^2 \frac{t}{2\hbar}(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})}{(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})^2} = \quad (23.12)$$

Рис. 14. Переход с уровня n в континуум состояний

$$= 4|\mathcal{H}_{sn}|^2 \varrho(E_n) \int \frac{\sin^2 \frac{t}{2\hbar}(E^{(s)} - E^{(n)})}{(E^{(s)} - E^{(n)})^2} d(E^{(s)} - E^{(n)}) = t \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{H}_{sn}|^2 \varrho(E_n).$$

Здесь интегрирование дает $\pi t/2\hbar$ (известный несобственный интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \alpha x}{x^2} dx$ равен $\pi \alpha$).

$\varrho(E_n)$ = число состояний s в единичном интервале энергий в окрестности E_n ;

$$\left[\text{Вероятность перехода в единицу времени} \right] = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{H}_{sn}|^2 \varrho(E_n). \quad (23.13)$$

Тема для обсуждения: Зависимость конечного распределения по состояниям от времени t и связь между характером этого распределения и принципом неопределенности*.

Пример. Борновское приближение.

Рассмотрим процесс рассеяния заряженной частицы на потенциале $U(\mathbf{x})$, понимая его как гамильтониан возмущения. Он не зависит от времени (сохранение энергии). Импульс падающей частицы обозначим через p , а импульс рассеянной — через p' (рис. 15). Итак, условия зада-

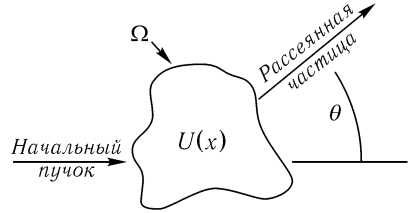


Рис. 15

Рассеяние на потенциале $U(\mathbf{x})$.

Объем взаимодействия («ящик») Ω .

Сохранение энергии $|p| = |p'|$.

$U(\mathbf{x}) \equiv \mathcal{H}$ — возмущение.

(23.14)

Начальное и конечное состояния представим как падающую и рассеянную волны (функции нормируются на «ящик» Ω). Поскольку временные части волновых функций одинаковы (ввиду сохранения энергии), запишем их пространственные части и матричный элемент перехода $p \rightarrow p'$ (из начального состояния в конечное):

Начальное состояние (падающая волна) $\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x}$,

Конечное состояние (рассеянная волна) $\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{\frac{i}{\hbar} p' \cdot x}$,

(Нормировка на Ω .)

(23.15)

Матричный элемент перехода $p \rightarrow p'$

$$\langle p | \mathcal{H} | p' \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} U(\mathbf{x}) e^{\frac{i}{\hbar} (p - p') \cdot x} d^3x = \frac{1}{\Omega} U_{p-p'}.$$

Таким образом, матричный элемент равен фурье-образу потенциальной энергии U , взятому с аргументом $p - p'$. Число конечных состояний в телесном угле $d\omega$ на единичный интервал энергий равно

$$\varrho d\omega = \frac{\Omega d\omega}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2 dp}{v dp} = \frac{\Omega p^2}{8\pi^3 \hbar^3 v} d\omega, \quad (23.16)$$

v — начальная скорость частицы, $v dp = dE$ (что верно и в релятивистском случае).

Тогда скорость переходов в телесный угол $d\omega$ (вероятность рассеяния в $d\omega$ за единицу времени) равна

$$d\omega \frac{v}{\Omega} \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{1}{\Omega} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \right|^2 \frac{\Omega p^2}{8\pi^3 \hbar^3 v} d\omega;$$

отсюда

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{p^2}{v^2} |U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2. \quad (23.17)$$

Формула (23.17) дает *эффективное дифференциальное сечение рассеяния* $d\sigma$. В нерелятивистском случае $m = \frac{p}{v} (= \text{const})$

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{m}{4\pi^2 \hbar^4} |U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2. \quad (23.18)$$

Пределы применимости полученных результатов. Рекомендуется обсудить пределы применимости борновского приближения. В частности, в случае рассеяния на прямоугольной яме (рис. 16) такое условие имеет вид

$$\frac{1}{\hbar} L(p - \sqrt{p^2 - 2mU}) \ll 1, \quad (23.19)$$

где L — ширина потенциальной ямы, а U — ее глубина (модуль рассеивающего потенциала). Это соответствует слабому возмущению (в скобках стоит разность импульсов частицы вне и внутри ямы).

Рассеяние на кулоновском центре.

Потенциальная энергия заряда ze в поле рассеивающего заряда Ze равна

$$U = zZe^2/r;$$

отсюда фурье-образ матричного элемента $U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ [см. (23.15)] есть

$$U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} = zZe^2 \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{x}}}{r} d^3x = \frac{4\pi zZe^2}{\frac{1}{\hbar^2} |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} = \frac{4\pi \hbar^2 zZe^2}{4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}; \quad (23.20)$$

$$|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'| = p.$$

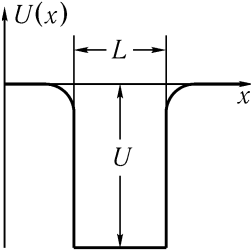


Рис. 16

При интегрировании здесь полезно учесть соотношение*

$$\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta(\mathbf{x}).$$

Для сечения рассеяния получим:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{z^2 Z^2}{4} \left(\frac{me^2}{p^2} \right)^2 \bigg/ \sin^4 \frac{\theta}{2}, \quad (23.21)$$

т. е. известную классическую формулу Резерфорда.

Темы для обсуждения:

1. Рассеяние на потенциальной яме и ядерные силы.
2. Предел больших длин волн — изотропное рассеяние.
3. Предел малых длин волн — рассеяние вперед.
4. Роль массы покоя (случай нейтрино).
5. Экспоненциальный закон распада некоторой первоначально связанной системы [случай (23.11)].

ЛЕКЦИЯ 24

Испускание и поглощение излучения

Здесь будет рассмотрено дипольное излучение, появляющееся уже в первом порядке теории возмущений, когда S -матрицу можно считать пропорциональной гамильтониану (см. лекцию 19). Будем предполагать, что на атом действует возмущение в форме электромагнитной волны, описываемое гамильтонианом

$$\mathcal{H} = ezB \cdot \cos \omega t, \quad (24.1)$$

где B — амплитуда напряженности возмущающего поля. Пусть в момент $t = 0$ атом находится в состоянии $E^{(n)}$ и под действием возмущения может перейти на более высокий уровень $E^{(m)}$ (рис. 17). Согласно (23.10),

$$a_m(t) = -\frac{i}{\hbar} eBZ_{mn} \int_0^t \cos \omega t e^{i\omega_{mn}t} dt, \quad (24.2)$$

Рис. 17

где величина ω_{mn} , называемая *боровской частотой перехода* между энергетическими уровнями m и n , положительна:

$$\omega_{mn} = \frac{E^{(m)} - E^{(n)}}{\hbar} > 0.$$

Заметим, что

$$\cos \omega t = \frac{1}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}).$$

Когда частота возмущающей волны приближается к частоте перехода $\omega \approx \omega_{mn}$, в этом выражении существенно только второе слагаемое. В таком случае (24.2) принимает вид

$$a_m(t) \approx -\frac{ieB}{2\hbar} z_{mn} \int_0^t e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} dt = \frac{eB}{2\hbar} z_{mn} \frac{e^{-i(\omega-\omega_{mn})t} - 1}{\omega - \omega_{mn}}.$$

Вероятность того, что в момент времени t атом окажется на энергетическом уровне $E^{(m)}$, равна

$$|a_m(t)|^2 = \frac{e^2 B^2}{\hbar^2} |z_{mn}|^2 \frac{\sin^2 \frac{t}{2} (\omega - \omega_{mn})}{(\omega - \omega_{mn})^2}. \quad (24.3)$$

Здесь обнаруживается интересное обстоятельство: при $\omega \rightarrow \omega_{mn}$ вероятность перехода достигает максимума; тогда говорят о *резонансном вынужденном переходе*.

Энергия электромагнитной световой волны равна $cB^2/8\pi$; рассматривая поглощение в случае, когда падающая волна имеет непрерывный спектр в окрестности резонансной частоты ω_{mn} , следует принять,

$$\frac{cB^2}{8\pi} = \frac{dI}{d\omega} d\omega. \quad (24.4)$$

Подставив это выражение в (24.3) и интегрируя по ω с учетом тождества $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \alpha x}{x^2} dx = \pi \alpha$, получим: $|a_m|^2 = t \frac{4\pi^2 e^2}{c\hbar^2} |z_{mn}|^2 \frac{dI}{d\omega} (\omega - \text{циклическая частота, а не телесный угол!})$. Итак,

$$\left[\begin{array}{c} \text{Скорость поглощения падающей} \\ \text{(вынуждающей) волны} \end{array} \right] = \frac{4\pi^2 e^2}{c\hbar^2} |z_{mn}|^2 \frac{dI}{d\omega}. \quad (24.5)$$

В случае изотропного излучения следует ввести объемную плотность энергии $U(\omega)d\omega$; тогда (24.5) приобретает вид

$$\text{Скорость поглощения} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\mathbf{x}_{mn}|^2 U(\omega_{mn}) \quad (24.6)$$

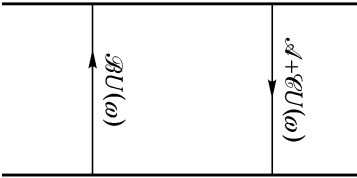
(множитель $1/3$ возникает при усреднении по всем возможным направлениям поляризации).

Связь между излучением и поглощением можно было бы вывести методами квантовой электродинамики, однако проще воспользоваться методом коэффициентов Эйнштейна $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ и $\mathcal{C}$. Скорость вынужденного перехода из состояния n в состояние m :

$$\text{Скорость перехода } n \rightarrow m = \mathcal{B}U(\omega)\mathcal{N}(n).$$

Здесь $\mathcal{N}(n)$ — число атомов в состоянии n (или m). Естественно предположить, что скорость обратного перехода из состояния m в состояние n равна

$$[\mathcal{A} + \mathcal{C}U(\omega)]\mathcal{N}(m),$$



где $\mathcal{A}$ — коэффициент спонтанного (самопроизвольного) перехода, а $\mathcal{C}$ — коэффициент вынужденного перехода $m \rightarrow n$.

Установим связь между коэффициентами $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ и $\mathcal{C}$. Числа атомов соответственно в состояниях n и m равны $\mathcal{N}(n)$ и $\mathcal{N}(m)$. Из (24.6) следует, что

$$\mathcal{B} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\mathbf{x}_{mn}|^2. \quad (24.7)$$

Рис. 18. На более высокий уровень возможны лишь вынужденные переходы, а на более низкий — как вынужденные, так и спонтанные

При термодинамическом равновесии система атомов подчиняется распределению Больцмана, так что

$$\frac{\mathcal{N}(m)}{\mathcal{N}(n)} = e^{-\frac{E^{(m)} - E^{(n)}}{\varkappa T}} = e^{-\frac{\hbar\omega_{mn}}{\varkappa T}} \quad (24.8)$$

($\varkappa$ — постоянная Больцмана).

По самому смыслу равновесия скорость перехода $n \rightarrow m$ должна быть равна скорости обратного перехода $m \rightarrow n$; следовательно,

$$\frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}U(\omega)} + \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{B}} = \frac{\mathcal{N}(n)}{\mathcal{N}(m)} = e^{\frac{\hbar\omega_{mn}}{\varkappa T}}. \quad (24.9)$$

По формуле Планка

$$U(\omega) = \frac{\hbar\omega^3/\pi^2 c^3}{e^{\hbar\omega/\varkappa T} - 1}; \quad (24.10)$$

подставляя (24.10) в (24.9), получаем:

$$\frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} \frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}} (e^{\hbar\omega/\varkappa T} - 1) + \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{B}} = e^{\hbar\omega/\varkappa T}.$$

Это равенство должно выполняться при любой температуре T , так что

$$\frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} \frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}} = 1, \quad \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{B}} = 1.$$

Отсюда следуют соотношения Эйнштейна

$$\mathcal{A} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \mathcal{B}, \quad \mathcal{C} = \mathcal{B}. \quad (24.11)$$

Используя значение коэффициента $\mathcal{B}$ (24.7) для спонтанных (самопроизвольных) переходов, находим:

$$\frac{1}{\tau} = \mathcal{A} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{x}_{mn}|^2, \quad (24.12)$$

где τ — среднее время жизни возбужденного состояния m по отношению к спонтанным переходам.

Результат (24.12) можно обобщить на случай системы многих частиц с помощью замены

$$e\mathbf{x} \rightarrow \sum_i e_i \mathbf{x}_i \quad (24.13)$$

(суммирование проводится по всем частицам); таким образом,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left| \sum e_i \langle m | \mathbf{x}_i | n \rangle \right|^2. \quad (24.14)$$

Итак, поток энергии спонтанного излучения пропорционален квадрату матричного элемента радиус-вектора (для одного электрона) или квадрату электрического момента (24.13) для системы заряженных частиц¹.

Темы для обсуждения:

1. Границы применимости формулы (24.12) (размеры атома $\ll \lambda$), т. е. длины волны излучения.

2. Квадрупольное излучение (следующее приближение теории возмущений)².

Случай центральных сил. Правила отбора. Вспоминая результаты лекции 7, выпишем некоторые тождества для сферических

¹Последняя интерпретация более физична и, конечно, правомерна также в случае одного электрона, который в волновой механике считается «размазанным». — *Прим. ред.*

²См., например, Гайтлер, *Квантовая теория излучения*, ИЛ, 1956. — *Прим. ред.*

функций:

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0}Y_{l,m} &= \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1,m} + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1,m}, \\ \sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,\mp 1}Y_{l,m\pm 1} &= \sqrt{\frac{(l\mp 1)(l+1\mp m)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1,m} - \\ &\quad - \sqrt{\frac{(l\pm m)(l+1\pm m)}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1,m};\end{aligned}\quad (24.15)$$

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,1} &= -\sin\theta e^{i\varphi}, & \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0} &= \cos\theta, \\ \sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,-1} &= \sin\theta e^{-i\varphi}.\end{aligned}\quad (24.16)$$

Из этих тождеств следует, что в центрально-симметричном поле *матричные элементы* координат *отличны от нуля только тогда*, когда

$$l' = l \pm 1, \quad m' = m \pm 1 \text{ или } m. \quad (24.17)$$

Эти условия называют *правилами отбора*¹; они определяют возможность того или иного акта излучения и поглощения и налагают так называемые «запреты» на переходы, не удовлетворяющие условиям (24.17). Исходя из правил (24.17), можно записать следующие выражения для матричных элементов:

$$\begin{aligned}\langle n', l+1, m+1 | x + iy | n, l, m \rangle &= -I \sqrt{\frac{(l+2+m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+3)}}, \\ \langle n', l+1, m+1 | x - iy | n, l, m \rangle &= 0, \\ \langle n', l+1, m | z | n, l, m \rangle &= I \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}}, \\ \langle n', l+1, m-1 | x + iy | n, l, m \rangle &= 0, \\ \langle n', l+1, m-1 | x - iy | n, l, m \rangle &= I \sqrt{\frac{(l+1-m)(l+2-m)}{(2l+1)(2l+3)}}.\end{aligned}\quad (24.18)$$

¹Правила отбора для магнитного квантового числа уже рассматривались в лекции 21. — *Прим. ред.*

Здесь

$$I = \int_0^{\infty} R_{nl}(r) R_{n', l+1}(r) r^3 dr. \quad (24.19)$$

Из формул (24.18) следует, что

$$|\langle n', l+1, m+1 | \mathbf{x} | n, l, m \rangle|^2 + |\langle n', l+1, m | \mathbf{x} | n, l, m \rangle|^2 + |\langle n', l+1, m-1 | \mathbf{x} | n, l, m \rangle|^2 = \frac{l+1}{2l+1} I^2, \quad (24.20)$$

так что скорость перехода из состояния (n, l, m) в состояние

$\left(n', l+1, m' = \begin{cases} m \\ m \pm 1 \end{cases} \right)$ равна

$$\left[\begin{array}{c} \text{Скорость перехода} \\ (n, l, m) \rightarrow (n', l+1, m') \end{array} \right] = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{l+1}{2l+1} I^2. \quad (24.21)$$

Отметим, что как соотношения (24.20), так и скорость перехода в (24.21) не зависят от магнитного квантового числа m , что проявляется в одинаковой яркости спектральных линий.

Аналогично скорость перехода из состояния (n, l, m) в состояние $\left(n', l-1, m' = \begin{cases} m \\ m-1 \end{cases} \right)$ равна

$$\left[\begin{array}{c} \text{Скорость перехода} \\ (n, l, m) \rightarrow (n', l-1, m') \end{array} \right] = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{l}{2l-1} I^2. \quad (24.22)$$

Пример. Время жизни $2p$ -состояния водорода. Согласно правилам отбора, возможен лишь спонтанный переход в состояние $1s$; следовательно,

$$R_{1s} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a}, \quad R_{2p} = \frac{1}{\sqrt{24} a^3} \frac{r}{a} e^{-r/2a},$$

$$I = \int R_{1s} R_{2p} r^3 dr = \frac{192\sqrt{2}}{243} a. \quad (24.23)$$

$$\text{Скорость перехода } (2p \rightarrow 1s) = \frac{294912}{177147} \frac{e^2 \omega^2 a^2}{\hbar c^3} =$$

$$= \frac{1152}{6561} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{m e^4}{2 \hbar^3} = 1,41 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1};$$

здесь $e^2/\hbar c = 1/137$ — постоянная тонкой структуры, или константа электромагнитного взаимодействия;

$$\begin{aligned} me^4/2\hbar^3 &= 2,067 \cdot 10^{16} \text{сек}^{-1} = \text{Постоянная Ридберга}/\hbar; \\ \omega &= (3/4)(me^4/2\hbar^3) \text{ — энергия первого боров-} \\ &\text{ского уровня;} \\ a &= \hbar^2/me^2 \text{ — боровский радиус.} \end{aligned} \quad (24.24)$$

*Темы для обсуждения*¹:

1. Разрешенные и запрещенные переходы.
2. Метастабильные состояния.
3. Обобщение правил отбора.
4. Излучение линейного осциллятора.
5. Правило суммы и эффективное число электронов.
6. Поляризация излучаемого света.

¹Большую помощь в изучении этих вопросов читателю могут оказать *Курсы квантовой механики* Л. Шифа (в частности, см. стр. 292–297, 303–306), Д. И. Блохинцева (стр. 300–317), а также книга А. Зоммерфельда *Строение атома и спектры*, т. II, М., 1956 (см. гл. I, §§8, 9; гл. II, §§8, 10). — *Прим. ред.*

здесь $e^2/\hbar c = 1/137$ — постоянная тонкой структуры, или константа электромагнитного взаимодействия;

$$\begin{aligned} me^4/2\hbar^3 &= 2,067 \cdot 10^{16} \text{сек}^{-1} = \text{Постоянная Ридберга}/\hbar; \\ \omega &= (3/4)(me^4/2\hbar^3) \text{ — энергия первого боров-} \\ &\text{ского уровня;} \\ a &= \hbar^2/me^2 \text{ — боровский радиус.} \end{aligned} \quad (24.24)$$

*Темы для обсуждения*¹:

1. Разрешенные и запрещенные переходы.
2. Метастабильные состояния.
3. Обобщение правил отбора.
4. Излучение линейного осциллятора.
5. Правило суммы и эффективное число электронов.
6. Поляризация излучаемого света.

¹Большую помощь в изучении этих вопросов читателю могут оказать *Курсы квантовой механики* Л. Шифа (в частности, см. стр. 292–297, 303–306), Д. И. Блохинцева (стр. 300–317), а также книга А. Зоммерфельда *Строение атома и спектры*, т. II, М., 1956 (см. гл. I, §§8, 9; гл. II, §§8, 10). — *Прим. ред.*

где α, β, γ — направляющие косинусы вектора спина. Из (25.3) вытекают правила антикоммутации для компонент оператора спина

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 0; \quad \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = 0; \quad \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = 0. \quad (25.4)$$

Выберем базис, в котором матрица $\hat{\sigma}_z$ диагональна:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (25.5)$$

Общая форма матрицы $\hat{\sigma}_x$ следует из условия ее эрмитовости:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} a & b \\ b^* & c \end{vmatrix}.$$

Тогда из правила $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = 0$ следует:

$$\begin{vmatrix} a & b \\ b^* & c \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a & b \\ b^* & c \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2a & 0 \\ 0 & -2c \end{vmatrix} = 0,$$

т. е. $a = c = 0$, так что $\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & b \\ b^* & 0 \end{vmatrix}$.

С другой стороны, $\hat{\sigma}_x^2 = \begin{vmatrix} |b|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$, т. е. $|b|^2 = 1$. Таким образом, матрица $\hat{\sigma}_x$ должна иметь вид

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{vmatrix}.$$

Выберем значения фаз базисных векторов так, чтобы получить $\alpha = 0$. Тогда окончательно

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}. \quad (25.6)$$

Поскольку к матрице $\hat{\sigma}_y$ приложимы те же самые соображения, что и к $\hat{\sigma}_x$, получаем:

$$\hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{vmatrix}.$$

Но следует удовлетворить еще условию $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 0$, откуда

$$e^{i\beta} + e^{-i\beta}, \quad \text{или} \quad e^{\pm i\beta} = \pm i.$$

Следовательно, $\hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}$, либо $\begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$. Попробуем исключить первый вариант матрицы σ_y . Пусть

$$\hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}; \quad \hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}.$$

Произведем теперь преобразование $\hat{\sigma} \rightarrow -\hat{\sigma}$, не меняющее общих свойств матриц:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}; \quad \hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Тогда унитарное преобразование $T = \sigma_y$ дает *спиновые операторы Паули* в их стандартной форме (второй вариант):

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (25.7)$$

Так как оба преобразования унитарны, то в целом преобразование также унитарно; тем самым доказана эквивалентность обоих выборов вида матрицы $\hat{\sigma}_y$. В дальнейшем будет использоваться стандартная (вторая) форма спиновых операторов.

Свойства операторов Паули. Прямо из (25.7) получим:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1, \quad \hat{\sigma}^2 = \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 = 3, \quad (25.8)$$

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = 0, \quad (25.9)$$

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z, \quad \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_x, \quad \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y, \quad (25.10)$$

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z, \quad [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x, \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y, \quad (25.11)$$

или в общем виде

$$[\hat{\sigma} \times \hat{\sigma}] = 2i\hat{\sigma}. \quad (25.12)$$

Все эти свойства удобно выразить в виде одной легко запоминающейся формулы $\sigma_i \sigma_j = i\varepsilon_{ijk} \sigma_k + \sigma_{ij}$, где ε — символ Леви – Чивита.

Вектор спина. Рассмотрим вектор

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}. \quad (25.13)$$

Из (25.12) для оператора $\widehat{\mathbf{S}}$ следует соотношение

$$[\widehat{\mathbf{S}} \times \widehat{\mathbf{S}}] = i\hbar \widehat{\mathbf{S}}. \quad (25.14)$$

Оно имеет в точности форму соотношений (18.5) и (20.26). Следовательно, величину (25.13) $\widehat{\mathbf{S}} = (\hbar/2)\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ можно интерпретировать как *собственный момент импульса (собственный механический момент) электрона*. Очевидно,

Собственные значения $\widehat{S}_x, \widehat{S}_y, \widehat{S}_z$ равны $\pm\hbar/2$; кроме того,

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}\sigma^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right). \quad (25.15)$$

Последнее явно напоминает собственные значения $\widehat{M}^2$ [см. (18.11)].

Вывод: Спиновый момент электрона $= \hbar/2$.

Магнитный момент. Из экспериментального эффекта Зеемана следует, что спину должен соответствовать магнитный момент

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_0 \boldsymbol{\sigma} \left(\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} \text{ — магнетон Бора} \right). \quad (25.16)$$

В точности такой же вывод следует из релятивистской теории электрона Дирака. В более точной теории, учитывающей радиационные поправки, Швингер в 1948 г. нашел:

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} \left(1 + \frac{1}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \right) = \frac{e\hbar}{2mc} \cdot 1,00116, \quad (25.17)$$

что еще лучше согласуется с экспериментом.

При движении электрона во внешнем магнитном поле B ($\mathbf{B} \parallel z$) к гамильтониану (21.27) прибавляется член

$$-B\mu_0\sigma_z = -B\frac{e\hbar}{2mc}\sigma_z. \quad (25.18)$$

Следует обратить внимание на характерное соотношение:

$$\frac{\text{Магнитный момент}}{\text{Момент импульса}/\hbar} = \begin{cases} \mu_0 & \text{для орбитального момента} \\ 2\mu_0 & \text{для спина} \end{cases} \quad (25.19)$$

Темы для обсуждения:

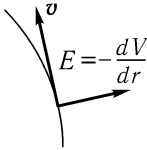
1. Движение изолированного вектора спинового магнитного момента в постоянном или переменном магнитном поле*.
2. Смысл «направления» вектора спина**.

ЛЕКЦИЯ 26

Электрон в центральном поле

Потенциальная энергия заряда e в центрально-симметричном электростатическом поле

$$U = -eV(r). \quad (26.1)$$



о

Рис. 19. Движение электрона в центральном электростатическом поле

Рассмотрим сначала классическое спин-орбитальное взаимодействие электрона, движущегося в центрально-симметричном поле ядра (рис. 19).

При движении в кулоновском поле со скоростью $\mathbf{v}$ электрон испытывает воздействие эффективного магнитного поля, напряженность которого приближенно равна $\mathbf{H} = -(1/c)\mathbf{v} \times \mathbf{E}$. Выражая напряженность кулоновского поля в виде градиента его потенциала, можем ввиду его центральной симметрии записать $\mathbf{E} = (dV/dr)(\mathbf{r}/r)$.

Итак, напряженность эффективного магнитного поля для электрона

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &\approx -\frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{E}, & \mathbf{E} &= -\frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}, \\ \mathbf{H} &\approx -\frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{r} \times \mathbf{v} = \\ &= -\frac{1}{mc} \frac{1}{r} V'(r) \mathbf{M} = -\frac{\hbar}{mc} \frac{V'(r)}{r} \mathbf{L}, \end{aligned} \quad (26.2)$$

где «штрих» означает производную по радиальной координате

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \text{Орбитальный момент} = \hbar \mathbf{L}, \\ \mu_0 \sigma &= \left[\begin{array}{l} \text{Собственный (спиновый)} \\ \text{магнитный момент} \end{array} \right] = \frac{e\hbar}{2mc} \sigma. \end{aligned} \quad (26.3)$$

Энергия взаимодействия собственного (спинового) магнитного момента электрона с эффективным магнитным полем равна

$$-\frac{V'(r)}{r} \frac{\hbar\mu_0}{mc} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = -\frac{e\hbar^2 V'(r)}{2m^2 c^2 r} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}). \quad (26.4)$$

(Знак «минус» соответствует отрицательному знаку заряда электрона.)

Поправка Томаса представляет собой релятивистский член уменьшающий энергию взаимодействия (26.4) вдвое. Этот вывод подтверждает и последовательно релятивистская теория Дирака.

Окончательно примем следующее выражение для энергии спин-орбитального взаимодействия:

$$-\frac{\hbar\mu_0}{2mc} \frac{V'(r)}{r} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = -\frac{e\hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}). \quad (26.5)$$

Полный гамильтониан электрона, движущегося в центрально-симметричном электрическом поле, запишется в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 - eV(r) - \frac{e\hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}). \quad (26.6)$$

Положим

$$\mathbf{S} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad (26.7)$$

где $\mathbf{S}$ — собственный (спиновый) механический момент электрона в единицах $\hbar$. Тогда (26.6) примет вид

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \hat{p}^2 - eV(r) - \frac{e\hbar^2 V'(r)}{2m^2 c^2 r} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) \equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2 (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \\ \hat{H}_1 &= \frac{1}{2m} \hat{p}^2 - eV(r), \quad \hat{H}_2 = -\frac{e\hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r}. \end{aligned} \quad (26.8)$$

Оператор полного момента. Определим

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \equiv \text{Оператор полного момента (в единицах } \hbar). \quad (26.9)$$

Коммутационные свойства введенных операторов:

$$\begin{aligned}
 [\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{L}}] &= i\hat{\mathbf{L}}, \text{ или} & [\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{S}}] &= i\hat{\mathbf{S}} \text{ или} \\
 [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hat{L}_z \text{ и циклические} & [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hat{S}_z \text{ и циклические} \\
 \text{перестановки;} & & \text{перестановки;} & \\
 [\hat{L}_x, \hat{\mathbf{L}}^2] &= 0 \text{ и то же} & [\hat{S}_x, \hat{\mathbf{S}}^2] &= 0 \text{ и то же} \\
 \text{для } \hat{L}_y \text{ и } \hat{L}_z; & & \text{для } \hat{S}_y \text{ и } \hat{S}_z; &
 \end{aligned}
 \tag{26.10}$$

$$[\hat{L}_x, \hat{S}_x] = [\hat{L}_x, \hat{S}_y] = \dots = 0, \tag{26.11}$$

$$\mathbf{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4}. \tag{26.12}$$

Из соотношений (26.9)–(26.11) следует:

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}} &= i\hat{\mathbf{J}} \text{ или } [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z \\
 &\text{и циклические перестановки.}
 \end{aligned}
 \tag{26.13}$$

Отсюда ясно, что *оператор $\hat{\mathbf{J}}$ обладает свойствами вектора момента импульса*. Из соотношений (26.13) следует:

$$[\hat{J}_x, \hat{\mathbf{J}}^2] = [\hat{J}_y, \hat{\mathbf{J}}^2] = [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}^2] = 0. \tag{26.14}$$

$$\begin{aligned}
 &\text{Все компоненты } \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{J}}, \\
 &\text{а также операторы } \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2 (= \frac{3}{4}), \hat{\mathbf{J}}^2 \\
 &\text{коммутируют с } \hat{H}_1 \text{ и с } \hat{H}_2.
 \end{aligned}
 \tag{26.15}$$

Поскольку все эти величины, очевидно, коммутируют с невозмущенным гамильтонианом $\hat{H}_1$, достаточно доказать, что они коммутируют с $\hat{H}_2$ — тем самым будет доказана их перестановочность и с полным гамильтонианом $\hat{H}$. Итак, докажем перестановочность с $\hat{H}_2$, например для компоненты оператора $\hat{\mathbf{J}}$:

$$[(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{J}_x] = 0. \tag{26.16}$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

$$\begin{aligned}
 [(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{J}_x] &= [(\hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_z \hat{S}_z), (\hat{L}_x + \hat{S}_x)] = \\
 &= [\hat{L}_y, \hat{L}_x] \hat{S}_y + [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \hat{S}_z + \hat{L}_y [\hat{S}_y, \hat{S}_x] + \hat{L}_z [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = \\
 &= -i\hat{L}_z \hat{S}_y + i\hat{L}_y \hat{S}_z - i\hat{L}_y \hat{S}_z + i\hat{L}_z \hat{S}_y = 0.
 \end{aligned}$$

Согласно (26.15)

$$[(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{\mathbf{J}}^2] = [(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{\mathbf{L}}^2] = [(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{\mathbf{S}}^2] = 0; \quad (26.16a)$$

имеем также соотношения

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}^2] = [\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{\mathbf{S}}^2] = 0, \quad (26.17)$$

$$[\hat{H}, (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}})] = 0, \quad (26.18)$$

$$[\hat{H}, \hat{J}_x] = [\hat{H}, \hat{J}_y] = [\hat{H}, \hat{J}_z] = 0, \quad (26.19)$$

причем

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}). \quad (26.20)$$

Отсюда

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2] = 0, \quad (26.21)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{S}}^2] = [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}^2] = 0. \quad (26.22)$$

Состояние атома. Будем характеризовать состояние атома, диагонализировав предварительно следующие коммутирующие друг с другом величины:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1, \quad \hat{H}_2, \quad \hat{\mathbf{L}}^2 = l(l+1), \quad \hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{3}{4}, \\ \hat{L}_z = m_l, \quad \hat{S}_z = m_s, \quad \hat{J}_z = m_l + m_s = m, \end{aligned} \quad (26.23)$$

где указаны диагональные элементы (собственные значения):

$$\begin{aligned} m_l = l, l-1, \dots, -l+1, -l; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}; \\ -l - \frac{1}{2} \leq m \leq l + \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Полный гамильтониан $\hat{H}$, вообще говоря, *не приводится* при этом к диагональному виду, так как $(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}})$ не коммутирует с $\hat{L}_z$ или с $\hat{S}_z$. Однако величина $(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}})$ коммутирует с $\hat{J}_z$:

$$[(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{J}_z] = 0,$$

так что $(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}})$ объединяет состояния с одинаковым магнитным квантовым числом $J_z = m$ и различными значениями $\hat{L}_z, \hat{S}_z$.

Существуют два типа таких состояний:

Собственные значения:

$$\begin{aligned} L_z = m - \frac{1}{2}, \quad S_z = \frac{1}{2}, \quad \text{состояние } \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \\ L_z = m + \frac{1}{2}, \quad S_z = -\frac{1}{2}, \quad \text{состояние } \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned}$$

(26.24)

Собственные функции:

$$\begin{aligned} \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \psi_{m-1/2, 1/2} = f(r) Y_{l, m-1/2} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \\ \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \psi_{m+1/2, -1/2} = f(r) Y_{l, m+1/2} \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Из формул (18.17), (18.18) и из лекции 25 следует, что

$$\hat{S}_x + i\hat{S}_y = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{S}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (26.25)$$

Кроме того,

$$(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) = \frac{1}{2}(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{S}_x - i\hat{S}_y) + \frac{1}{2}(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{S}_x + i\hat{S}_y) + \hat{L}_z \hat{S}_z. \quad (26.26)$$

Отсюда

$$\begin{aligned} (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) Y_{l, m-1/2} &= \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} Y_{l, m+1/2}, \\ (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) Y_{l, m+1/2} &= \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} Y_{l, m-1/2}, \end{aligned} \quad (26.27)$$

где величина $(m \pm 1/2)$ — целое число; далее

$$\begin{aligned} (\hat{S}_x + i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} &= 0, \quad (\hat{S}_x + i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \\ (\hat{S}_x - i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} &= 0, \quad (\hat{S}_x - i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (26.28)$$

Существуют два типа таких состояний:

Собственные значения:

$$\begin{aligned} L_z = m - \frac{1}{2}, \quad S_z = \frac{1}{2}, \quad \text{состояние } \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \\ L_z = m + \frac{1}{2}, \quad S_z = -\frac{1}{2}, \quad \text{состояние } \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned}$$

(26.24)

Собственные функции:

$$\begin{aligned} \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \psi_{m-1/2, 1/2} = f(r) Y_{l, m-1/2} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \\ \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \psi_{m+1/2, -1/2} = f(r) Y_{l, m+1/2} \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Из формул (18.17), (18.18) и из лекции 25 следует, что

$$\hat{S}_x + i\hat{S}_y = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{S}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (26.25)$$

Кроме того,

$$(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) = \frac{1}{2}(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{S}_x - i\hat{S}_y) + \frac{1}{2}(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{S}_x + i\hat{S}_y) + \hat{L}_z \hat{S}_z. \quad (26.26)$$

Отсюда

$$\begin{aligned} (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) Y_{l, m-1/2} &= \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} Y_{l, m+1/2}, \\ (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) Y_{l, m+1/2} &= \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} Y_{l, m-1/2}, \end{aligned} \quad (26.27)$$

где величина $(m \pm 1/2)$ — целое число; далее

$$\begin{aligned} (\hat{S}_x + i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} &= 0, \quad (\hat{S}_x + i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \\ (\hat{S}_x - i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} &= 0, \quad (\hat{S}_x - i\hat{S}_y) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (26.28)$$

Собственные значения оператора $\hat{\mathbf{J}}^2$:

а) Для $(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) = \frac{1}{2}l$

$$\mathbf{J}^2 = l(l+1) + \frac{3}{4} + l = \left(l + \frac{1}{2}\right) \left(l + \frac{1}{2} + 1\right).$$

Спин $\mathbf{s}$ либо параллелен $\mathbf{l}$, либо — *векторная модель**; тогда

$$J = \left(l + \frac{1}{2}\right); \quad \mathbf{J}^2 = J(J+1).$$

Собственные функции для этого случая уже даны в (26.31).

б) Для $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = -\frac{1}{2}(l+1)$

$$\mathbf{J}^2 = l(l+1) + \frac{3}{4} - l - 1 = \left(l + \frac{1}{2}\right) \left(l - \frac{1}{2}\right).$$

Спин $\mathbf{s}$ антипараллелен $\mathbf{l}$;

$$J = l - \frac{1}{2}; \quad \mathbf{J}^2 = J(J+1) = l^2 - \frac{1}{4}.$$

Соответствующие собственные функции уже даны в (26.32).

Дублетное расщепление энергетических уровней. Последний член гамильтониана (26.8)

$$-\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{V'(r)}{r} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) \quad (26.35)$$

можно рассматривать как возмущение, сдвигающее энергетические уровни; величину этого сдвига дает теория возмущений:

$$\delta E = \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \left(\int V'(r) R_l^2(r) r dr \right) \times \begin{cases} \frac{l}{2}, & \text{если } J = l + \frac{1}{2}, \\ -\frac{l+1}{2}, & \text{если } J = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (26.36)$$

Здесь $V'(r)$ обычно положительна; через $R_l(r)$ обозначена радиальная волновая функция.

Дублетный спектр. Типичным примером таких спектров могут служить спектры атомов щелочных металлов (рис. 20).

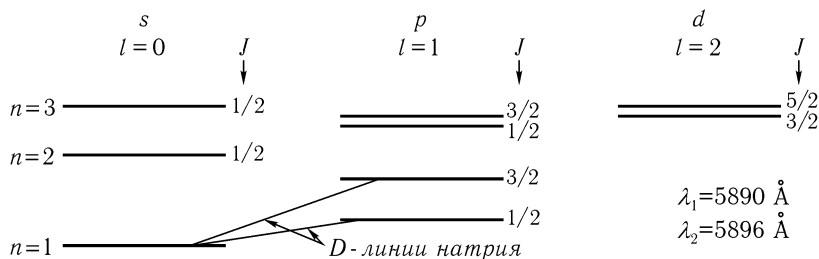


Рис. 20

Уровни атома водорода при $n = 2$. Из лекции 8 без учета спина находим:

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2 \times 2^2} \text{ для уровней } 2s \text{ и } 2p.$$

Таким образом, получается всего *одна* линия (вырождение).

Расщепление $\delta_1 E$ вследствие различных ориентаций спина. Если потенциал V в (26.36) взять в форме $V = e/r$, а в качестве радиальных волновых функций $R(r)$ — функции (8.20),

$$R_{2p} = \frac{re^{-r/2a}}{\sqrt{24a^5}},$$

то изменения собственных значений энергии за счет спин-орбитального взаимодействия будут равны¹

$$\begin{aligned} \delta_1 E(2s) &= 0, \\ \delta_1 E(2p) &= \frac{e^2 \hbar^2}{48m^2 c^2} \frac{1}{a^3} \times \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{для } J = \frac{3}{2}, \\ -1 & \text{для } J = \frac{1}{2}. \end{cases} \end{aligned} \quad (26.37)$$

Релятивистский расчет возмущения. Результаты (26.37) являются нерелятивистскими. Отыщем релятивистскую поправку $\delta_2 E$ к энергии

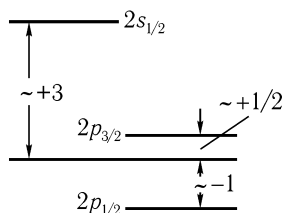


Рис. 21. Расщепление уровней при различных ориентациях спина (нерелятивистская теория)

¹См. более общую формулу у Шиффа, стр. 332, 333. — Прим. ред.

уровней. Так как кинетическая энергия равна

$$E_k = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} - mc^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots, \quad (26.38)$$

то возмущающий гамильтониан следует взять в виде

$$\mathcal{H} = \frac{1}{8m^3 c^2} p^4 = -\frac{\hbar^4}{8m^3 c^2} (\nabla^2)^2. \quad (26.39)$$

При таком подходе полностью игнорируется существование спина электрона.

В первом порядке теории возмущений*

$$\delta_2 E(2s) = -\frac{5}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}, \quad \delta_2 E(2p) = -\frac{7}{384} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}. \quad (26.40)$$

Вместе оба рассмотренных эффекта приводят к поправкам

$$\begin{aligned} \delta_1(E_{2s}) + \delta_2(E_{2s}) &= -\frac{5}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}, \\ \delta_1(E_{2p_{1/2}}) + \delta_2(E_{2p_{1/2}}) &= \left(-\frac{1}{48} - \frac{7}{384}\right) \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2} = -\frac{5}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}, \\ \delta_1(E_{2p_{3/2}}) + \delta_2(E_{2p_{3/2}}) &= \left(\frac{1}{96} - \frac{7}{384}\right) \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2} = -\frac{1}{128} \frac{e^8 m}{\hbar^4 c^2}. \end{aligned}$$

(Общие формулы см. у Шиффа, стр. 368, 369.)

Отметим, что первые две поправки совпали, т.е. соответствующие уровни не разошлись! Общая картина для уровней $2s$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$, когда присутствует возмущение δ_1 , а затем и возмущение $\delta_1 + \delta_2$, дана на рис. 22.

Картина расщепления уровней при учете спин-орбитального взаимодействия, спин-орбитального взаимодействия и релятивистской поправки к нему, спин-орбитального взаимодействия с релятивистской поправкой и сдвигом Лэмба.

На том же рис. 22 изображено дальнейшее (и окончательное) снятие вырождения уровней $2s$ и $2p_{1/2}$, носящее название *лэмбовского сдвига*.

Впервые этот эффект измерили Лэмб и Ризерфорд в 1947 г. Лэмбовский сдвиг — это относительный сдвиг $2s$ - и $2p_{1/2}$ -уровней водородо-подобных атомов, предсказанный и теоретически рассчитанный Бете в

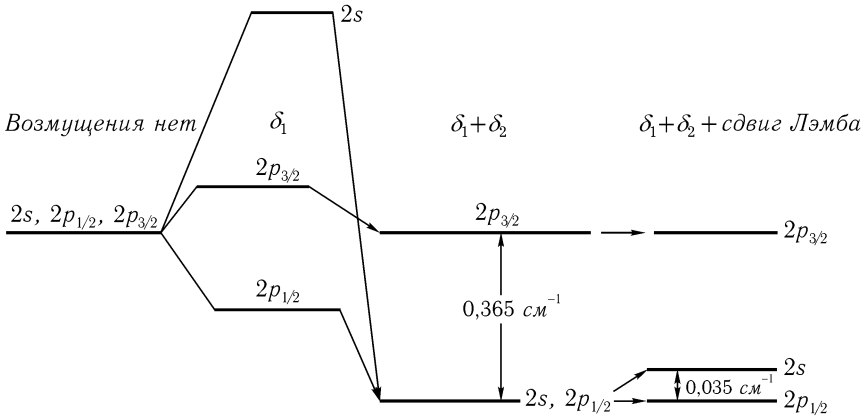


Рис. 22. Картина расщепления уровней при учете спин-орбитального взаимодействия, спин-орбитального взаимодействия и релятивистской поправки к нему, спин-орбитального взаимодействия с релятивистской поправкой и сдвигом Лэмба

том же 1947 г. По идее Бете (и Крамерса) лэмбовский сдвиг представляет собой изменение энергии электрона за счет его взаимодействия с полем излучения (вакуумом фотонов, приводящим к перенормировке собственной энергии, различной для разных состояний, если говорить в терминах квантовой теории поля). Теория и эксперимент дают в хорошем согласии друг с другом численное значение лэмбовского сдвига около $1057,8 \text{ Мгц}$ для водорода.

Формула Бете для лэмбовского сдвига ns -уровней:

$$\frac{8}{3\pi n^3} \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \ln \frac{mc^2}{|E_n - E_s|} + \text{Поправки более высоких порядков.}$$

Лекция 27

Аномальный эффект Зеемана

«Аномальным эффектом Зеемана» называется расщепление спектральных линий некоторых атомов в слабых магнитных полях. Таким образом, «аномальный» эффект является более обычным, чем «нормальный», так как для реализации последнего необходимы более сильные поля. Названия этих эффектов сложились исторически в связи с тем, что «нормальный» эффект удалось объяснить на более раннем этапе развития теории. Вместе с тем нормальный эффект Зеемана является частным случаем аномального*.

Усложним задачу предыдущей лекции, введя магнитное поле B вдоль оси z . Энергия взаимодействия атомного электрона с внешним магнитным полем равна

$$B\mu_0(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z), \quad (27.1)$$

а невозмущенный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 - eV(r). \quad (27.2)$$

Гамильтониан возмущения можно записать как

$$\widehat{\mathcal{H}} = -\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{-V'(r)}{r}(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) + B\mu_0(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z). \quad (27.3)$$

Отметим, что все величины, $\mathbf{L}^2$, $\mathbf{S}^2 = 3/4$, $m = L_z + S_z$ коммутируют с $\mathcal{H}$. (27.4)

В отсутствие возмущения имеет место $2l$ -кратное вырождение.

Невозмущенные собственные функции имеют вид (27.5)

$$\psi_{lm}(r, \theta, \varphi) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \times \text{Спин } \{\uparrow \text{ либо } \downarrow\}.$$

(Спиновая волновая функция характеризует только ориентацию спина и нормирована на 1.)

Обозначая коэффициент в формуле (26.36) через

$$k = -\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \int [-V'(r)] R_l^2(r) r dr, \quad (27.6)$$

запишем матрицу возмущающего гамильтониана, которая объединяет состояния, согласно (26.24) [см. также (26.30)], как

$$\frac{k}{2} \begin{vmatrix} m - \frac{1}{2} & \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} \\ \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} & -m - \frac{1}{2} \end{vmatrix} + B\mu_0 \begin{vmatrix} m + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & m - \frac{1}{2} \end{vmatrix}. \quad (27.7)$$

Собственные значения энергии возмущения являются корнями уравнения

$$x^2 + \left(\frac{k}{2} - 2B\mu_0 m\right)x + \left(m^2 - \frac{1}{4}\right)B^2\mu_0^2 - \\ - B\mu_0 km - \frac{k^2}{4}l(l+1) = 0 \quad (27.8)$$

и равны

$$\delta E = -\frac{k}{4} + B\mu_0 m \pm \frac{1}{2} \sqrt{k^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + 2B\mu_0 km + B^2\mu^2}. \quad (27.9)$$

Полученная формула для значений δE справедлива при $|m| \leq l - \frac{1}{2}$; в случае же $m = \pm(l + \frac{1}{2})$ энергия возмущения принимает вид

$$\delta E = \frac{kl}{2} \pm B\mu_0(l+1).$$

В случае слабого магнитного поля $B\mu_0 \ll k$ сдвиг уровней равен

$$\delta E = \begin{cases} \frac{k}{2}l + B\mu_0 m \frac{2l+2}{2l+1} & |m| = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{k}{2}(l+1) + B\mu_0 m \frac{2l}{2l+1}, & -l + \frac{1}{2} \leq m \leq l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (27.10)$$

[знак в формуле (27.9) выбирается из сравнения с (26.36)].

Этот случай соответствует расщеплению *всех* уровней и носит название *аномального эффекта Зеемана*.

Вырождение частично восстанавливается, когда напряженность магнитного поля становится большой, $B\mu_0 \geq k$; тогда

$$\delta E = \begin{cases} B\mu_0 \left(m + \frac{1}{2} \right), \\ B\mu_0 \left(m - \frac{1}{2} \right) \end{cases} \quad (27.11)$$

и имеет место *нормальный эффект Зеемана*.

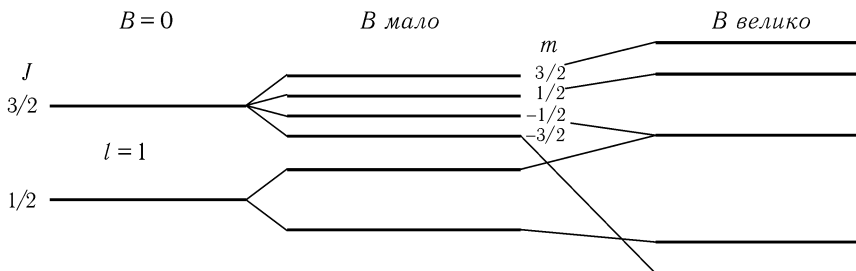


Рис. 23

Картина расщепления уровней $J = 3/2$ и $J = 1/2$ в магнитном поле для случаев, когда $B = 0$, когда B мало и когда B велико, изображена на рис. 23.

ЛЕКЦИЯ 28

Сложение векторов момента

В лекции 26 были введены

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{L}} & \text{ — оператор орбитального момента } \mathbf{L}, \\ \widehat{\mathbf{S}} & \text{ — оператор спина или собственного момента } \mathbf{S}, \\ \widehat{\mathbf{J}} & = \widehat{\mathbf{L}} + \widehat{\mathbf{S}} \text{ — оператор полного момента } \mathbf{J}.\end{aligned}\tag{28.1}$$

Пусть, как было показано, имеют место перестановочные соотношения

$$[\widehat{\mathbf{L}}, \widehat{\mathbf{S}}] = 0,\tag{28.2}$$

$$[\widehat{\mathbf{L}} \times \widehat{\mathbf{L}}] = i\widehat{\mathbf{L}}, \quad [\widehat{\mathbf{S}} \times \widehat{\mathbf{S}}] = i\widehat{\mathbf{S}}, \quad (\hbar = 1);\tag{28.3}$$

тогда, как нетрудно показать,

$$[\widehat{\mathbf{J}} \times \widehat{\mathbf{J}}] = i\widehat{\mathbf{J}}.\tag{28.4}$$

Таким образом, можно построить две системы операторов, таких, что внутри каждой операторы коммутируют между собой:

$$\text{Система 1: } \widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{S}}^2, \widehat{L}_z, \widehat{S}_z;\tag{28.5}$$

$$\text{Система 2: } \widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{S}}^2, \widehat{\mathbf{J}}^2, \widehat{J}_z.\tag{28.6}$$

Очевидно, это обстоятельство можно использовать для классификации состояний физических систем (см. лекцию 20).

Взяв первую систему, следует пользоваться таким представлением, в котором ее операторы диагональны; тогда в основу классификации кладутся собственные значения

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^2 & = l(l+1), & \mathbf{S}^2 & = s(s+1), \\ L_z & = \lambda, & S_z & = \mu,\end{aligned}\tag{28.7}$$

где

$$\begin{aligned}\lambda & = -l, -l+1, \dots, l-1, l, \\ \mu & = -s, -s+1, \dots, s-1, s,\end{aligned}$$

причем l и s принимают как целые, так и полуцелые значения. Если l — результирующий орбитальный момент, то l должно быть целым. Если s — результирующий спин, то s должно быть целым в случае четного числа электронов и полуцелым в случае нечетного числа электронов. В классификации (28.5) и (28.7) собственная функция системы имеет вид

$$|L_z = \lambda, S_z = \mu\rangle \text{ или, короче, } |\lambda, \mu\rangle. \quad (28.8)$$

В общей сложности число таких собственных функций («собственных векторов» гильбертова пространства) равно $(2l + 1) \times (2s + 1)$.

Перейдем теперь от этого представления к представлению (и, соответственно, к другой классификации), использующему вторую систему операторов — (28.6).

В этом случае операторы системы (28.6) диагональны, а их собственные значения равны

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= l(l+1); & \mathbf{S}^2 &= s(s+1); \\ \mathbf{J}^2 &= j(j+1); & J_z &= L_z + S_z = m, \end{aligned} \quad \left| \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right. \quad (28.9)$$

где j — целое или полуцелое число,

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j.$$

Собственная функция системы во второй классификации записывается как

$$|\mathbf{J}^2 = j(j+1), j_z = m\rangle \text{ или, короче, } |j, m\rangle. \quad (28.10)$$

Вопрос: какие значения может принимать число j при данных l и s ?

Ответ:

Правило векторной модели:

$$j = l + s, l + s - 1, \dots, |l - s|. \quad (28.11)$$

Набросок доказательства:

$$\begin{aligned} m &= \lambda + \mu, & \lambda &\leq l, \quad m \leq l + s, \\ &\text{следовательно, } j_{max} &= l + s. \end{aligned} \quad (28.12)$$

Многократно действуя на волновую функцию

оператором

получаем последовательно функции

либо

Совокупность функций (28.14) уже содержит одну линейную комбинацию функций (28.15), другие же линейные комбинации получаются при многократном действии оператора $\hat{J}_-$ на следующие $2(l+s)-1$ собственные функции типа (28.10):

И т. д.¹

¹Полученные результаты характерны для так называемого кронекеровского произведения в теории групп. — *Прим. ред.*

Коэффициенты Клебша – Гордана. Указанный выше метод позволяет показать, что

$$\langle \lambda, \mu | j, m \rangle = 0 \quad (28.17)$$

при $\lambda + \mu \neq m$.

Кроме того, с его помощью можно получить численные значения величин $\langle \lambda, m - \lambda | j, m \rangle$, т.е. указать коэффициенты разложения функций одного представления по функциям другого представления (сравнение классификаций). Коэффициенты такого разложения называют *коэффициентами векторного сложения* или *коэффициентами Клебша – Гордана*. Общие формулы этих коэффициентов имеют весьма сложный вид. В важных, частных случаях $s = \frac{1}{2}$ и $s = 1$ [см. (26.31) и (26.32)] они могут быть записаны следующим образом:

$s = \frac{1}{2}$		
	$l_z = m - \frac{1}{2}$ $s_z = \frac{1}{2}$	$l_z = m + \frac{1}{2}$ $s_z = -\frac{1}{2}$
$j = l + \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}}$	$\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}}$
$j = l - \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m}{2l+1}}$	$\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m}{2l+1}}$

(28.18)

$s = 1$			
	$l_z = m - 1$ $s_z = 1$	$l_z = m$ $s_z = 0$	$l_z = m + 1$ $s_z = -1$
$j = l + 1$	$\sqrt{\frac{(l+m)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+2)}}$	$\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l-m)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+2)}}$
$j = l$	$-\sqrt{\frac{(l+m)(l-m+1)}{2l(l+1)}}$	$\frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l-m)(l+m+1)}{2l(l+1)}}$
$j = l - 1$	$\sqrt{\frac{(l-m)(l-m+1)}{2l(2l+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{l(2l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m)}{2l(2l+1)}}$

(28.19)

Другие подобные формулы можно найти в книге Кондона и Шортли¹.

¹См. Кондон Г., Шортли Е., Теория атомных спектров, ИЛ, 1949, стр. 80. — Прим. ред.

Значение произведения $(\widehat{\mathbf{L}} \cdot \widehat{\mathbf{S}})$ равно

$$(\widehat{\mathbf{L}} \cdot \widehat{\mathbf{S}}) = \frac{1}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}, \quad (28.20)$$

что следует из соотношений

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{L}} + \widehat{\mathbf{S}} &= \widehat{\mathbf{J}}, \\ \widehat{\mathbf{J}}^2 &= \widehat{\mathbf{L}}^2 + \widehat{\mathbf{S}}^2 + 2(\widehat{\mathbf{L}} \cdot \widehat{\mathbf{S}}). \end{aligned}$$

Заметим, что результат (28.20) не зависит от m ! Это обстоятельство можно выразить следующим более общим образом:

Теорема. Если собственные функции задаются в классификации $|n, j, m\rangle$ и $\widehat{A}$ есть некоторый оператор, инвариантный относительно поворотов (что означает $[\widehat{A}, \widehat{\mathbf{J}} = 0]$), то

$$\langle n', j', m' | \widehat{A} | n, j, m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} f(n, n', j). \quad (28.22)$$

Эта теорема тесно связана с теоремой Вигнера* (28.15).

Теоремы о величине матричных элементов векторного оператора $\widehat{\mathbf{A}}$:

$$\langle n', j', m' | \widehat{\mathbf{A}} | n, j, m \rangle = 0,$$

если только не выполняются условия

$$j' = j + 1, j, j - 1; \quad m' = m + 1, m, m - 1; \quad (28.23)$$

кроме того,

$$\langle n', 0, 0 | \widehat{\mathbf{A}} | n, 0, 0 \rangle = 0.$$

На основании этих теорем можно сформулировать следующие

Правила отбора для оптических переходов:

Разрешены переходы

$$\begin{array}{c} \nearrow j+1 \\ j \rightarrow j \\ \searrow j-1 \end{array}, \quad \begin{array}{c} \nearrow m+1 \\ m \rightarrow m \\ \searrow m-1 \end{array}. \quad (28.24)$$

Переход $j = 0 \rightarrow j = 0$ запрещен.

Правила отбора по четности:

При разрешенных переходах четность меняется, $(+) \rightleftharpoons (-)$. (28.25)

(Это обстоятельство связано с тем фактом, что электрический момент является полярным, а не аксиальным вектором.)

Темы для обсуждения:

1. Правила отбора для электрического квадрупольного, магнитного дипольного и других переходов¹.

Матричные элементы компонент некоторого вектора выражаются через произведение функций вида $f(n, n', j, j')$ на некоторый множитель, зависящий от j, j', m, m' и от того, какая компонента вектора была взята. (28.26)

Укажем единственные отличные от нуля матричные элементы компонент некоторого вектора $\hat{\mathbf{A}} = (\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$:

$$\begin{aligned} \langle m+1 | \hat{X} + i\hat{Y} | m \rangle, \\ \langle m | \hat{Z} | m \rangle, \\ \langle m-1 | \hat{X} - i\hat{Y} | m \rangle. \end{aligned}$$

В различных случаях они следующим образом зависят от квантовых чисел:

Переход $j \rightarrow j+1$:

$$\begin{aligned} \langle m+1 | \hat{X} + i\hat{Y} | m \rangle &\sim -\sqrt{(j+m+1)(j+m+2)}, \\ \langle m | \hat{Z} | m \rangle &\sim \sqrt{(j-m+1)(j+m+1)}, \\ \langle m-1 | \hat{X} - i\hat{Y} | m \rangle &\sim \sqrt{(j-m+1)(j-m+2)}. \end{aligned} \quad (28.27)$$

Переход $j \rightarrow j$:

$$\begin{aligned} \langle m+1 | \hat{X} + i\hat{Y} | m \rangle &\sim \sqrt{(j+m+1)(j-m)}, \\ \langle m | \hat{Z} | m \rangle &\sim m, \\ \langle m-1 | \hat{X} - i\hat{Y} | m \rangle &\sim \sqrt{(j-m+1)(j+m)}. \end{aligned} \quad (28.28)$$

¹См. А. Зоммерфельд, *Строение атома и спектры*, т. II, М., 1956, стр. 611, 619, 620, 622. — *Прим. ред.*

Переход $j \rightarrow j - 1$:

$$\begin{aligned}\langle m+1 | \hat{X} + i\hat{Y} | m \rangle &\sim -\sqrt{(j-m-1)(j-m)}, \\ \langle m | \hat{Z} | m \rangle &\sim -\sqrt{j^2 - m^2}, \\ \langle m-1 | \hat{X} - i\hat{Y} | m \rangle &\sim \sqrt{(j+m)(j+m-1)}.\end{aligned}\tag{28.29}$$

Внимание! Не следует забывать, что коэффициенты пропорциональности во всех формулах (28.27)–(28.29) различны (это отражено знаком « $\sim$ »). Заметим, что во всех трех приведенных случаях (28.27)–(28.29) сумма

$$\sum_{m'} \left| \langle m' | \hat{X} | m \rangle \right|^2 + \left| \langle m' | \hat{Y} | m \rangle \right|^2 + \left| \langle m' | \hat{Z} | m \rangle \right|^2 \tag{28.30}$$

не зависит от магнитного квантового числа m . Таким образом, от m не зависят соответствующие вероятности переходов (в качестве $\hat{\mathbf{A}}$ можно было бы взять вектор электрического момента), и, следовательно, *время жизни* относительно спонтанного перехода для возбужденных состояний при различных значениях m одинаково¹.

¹См., например, В. Хейне, *Теория групп в квантовой механике*, ИЛ, 1963, стр. 119 и далее. — *Прим. ред.*

Лекция 29

Атомные мультиплеты

Под мультиплетами понимают *тонкую структуру спектральных линий*, обусловленную снятием вырождения из-за наличия спина у электрона. Теория, игнорирующая взаимодействие спинового магнитного момента с орбитальным, приводит к многократному вырождению ряда уровней; при учете же указанного взаимодействия это вырождение часто снимается, причем соответствующие энергетические поправки бывают малыми, линии в спектре разрешаются слабо, чем и вызвано представление о «тонкой» структуре линий.

Как и прежде мы запишем

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \quad (29.1a)$$

где $\hat{H}_1$ — (релятивистский или нерелятивистский) гамильтониан без учета спина, а $\hat{H}_2(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})$ — гамильтониан спин-орбитального взаимодействия. Если иметь в виду самый общий случай, то представляется нецелесообразным уточнять заранее форму множителя H_2 в гамильтониане (29.1).

Так как $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$ коммутируют с операторами $\hat{\mathbf{L}}$ и $\hat{\mathbf{S}}$, то полный гамильтониан $\hat{H}$ коммутирует с $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{S}}^2$, $\hat{J}^2$ и $\hat{J}_z$. (29.16)

Для оператора $(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}})$ верна формула (28.20),

$$(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) = \frac{1}{2} \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}. \quad (29.2)$$

Перейдем к принятым в спектроскопии обозначениям:

$\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{J}}$ — векторные операторы,	(29.3)
L, S, J — числа (целые или полуцелые), соответствующие собственным значениям операторов.	

При фиксированных значениях L и S число J может принимать все значения $|L - S| \leq J \leq |L + S|$, изменяясь целочисленными ступенями. (29.4)

Для системы уровней с одинаковыми числами n , L , S запишем:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \frac{1}{2} \hat{H}_2 \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}. \quad (29.5)$$

Выберем представление, в котором матрица $\hat{H}_1$, (а также $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{J}^2$) диагональна. Пусть добавка $\hat{H}_2$ будет мала: тогда можно использовать теорию возмущений. В случае изолированной группы уровней операторы $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$ ведут себя подобно числам: вместо $\hat{H}_2$ берется его среднее значение, а вместо $\hat{H}_1$ — диагональный элемент соответствующей матрицы.

Каждому значению полного момента $\hat{J}$ в мультиплете соответствует один вполне определенный энергетический уровень. Из формулы (29.4) видно, что число J принимает $2S+1$ значение при $S \leq L$ и $2L+1$ значение при $S > L$. Несмотря на это, мультиплет всегда называют $(2S+1)$ -плетом, т. е. говорят « $(S=)$ -синглет, $(S=1/2)$ -дублет, $(S=1)$ -триплет» и т. д. Мультиплеты различают нормальные и аномальные:

$$\begin{aligned} \text{при } \hat{H}_2 > 0 & \text{ — нормальный мультиплет,} \\ \text{при } \hat{H}_2 < 0 & \text{ — аномальный мультиплет.} \end{aligned} \quad (29.6)$$

Каждое значение орбитального числа L обозначается соответствующей буквой: S , P , D , Таким образом, состояние можно указать, используя одну такую букву с индексами, причем сама буква указывает значение орбитального квантового числа L , индекс слева вверху — значение $2S+1$, индекс справа внизу — значение полного момента J . В качестве примера приведем нормальный D -триплет (рис. 24):

3D_1 соответствует $S=1$, $L=2$, $J=1$; вообще же $({}^{2S+1}L)_J$.

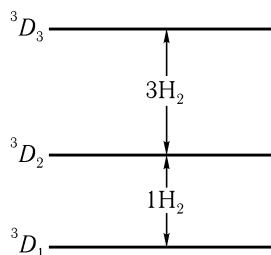


Рис. 24. Нормальный D -триплет

ЗАМЕЧАНИЕ.

Правило интервала. Расстояние между двумя энергетическими уровнями мультиплета, характеризуемыми соответственно J и $J+1$, пропорционально $J+1$.

Каждый уровень мультиплета $(2J + 1)$ -кратно вырожден. Это вырождение снимается магнитным полем, выделяющим в пространстве некоторое направление z ($\mathbf{B} \parallel z$) и дающим добавку к энергии возмущения:

$$\hat{H}_3 = B\mu_0(L_z + 2S_z) = B\mu_0(J_z + S_z) = B\mu_0(m + S_z). \quad (29.7)$$

Пусть

$$\hat{H}_3 \ll \hat{H}_2; \quad (29.8)$$

тогда рассмотрение ведется в первом порядке теории возмущений. Заметим, что имеет место перестановочное соотношение

$$[\hat{H}_3, \hat{\mathbf{J}}] = 0,$$

благодаря чему не происходит комбинирования функций $(2J + 1)$ -кратно вырожденных уровней. При этом

$$\delta_3 E = \langle J, m | \hat{H}_3 | J, m \rangle = B\mu_0(m + \langle J, m | \hat{S}_z | J, m \rangle). \quad (29.9)$$

Из второй формулы (28.8) следует, что

$$\langle J, m | \hat{S}_z | J, m \rangle = \frac{\langle J, J | \hat{S}_z | J, J \rangle}{J} m, \quad (29.10)$$

причем

$$\langle J, J | \hat{S}_z | J, J \rangle = \frac{S(S + 1) + J(J + 1) - L(L + 1)}{2(J + 1)}. \quad (29.11)$$

Набросок доказательства. Из определения $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}}$ следует, что

$$2(\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) = J(J + 1) + S(S + 1) - L(L + 1)$$

или

$$2(\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) = 2J_z S_z + S_- J_+ + S_+ J_- = 2(J_z + 1)S_z + S_- J_+ + J_- S_+,$$

где использованы обозначения

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y, \quad \hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$$

и соотношение

$$\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i \hat{S}_z.$$

Имея далее в виду, что $\hat{J}_+ |J, J\rangle = 0$ и $\langle J, J | \hat{J}_- = 0$, получаем:

$$\langle J, J | 2\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | J, J \rangle = 2(J+1) \langle J, J | \hat{S}_z | J, J \rangle,$$

откуда ясна справедливость выражения (29.11).

Энергию (29.9) теперь можно представить в виде

$$\delta_3 E = B \mu_0 g m, \quad (29.12)$$

где коэффициент

$$\begin{aligned} g &= 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} = \\ &= \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \end{aligned} \quad (29.13)$$

есть *множитель Ланде*.

Рекомендуется сравнить полученный результат с формулой (27.10) для случая $S = 1/2$.

Тема для обсуждения.

Предельный случай $B \mu_0 \gg H_2$ и эффект Пашена–Бака¹ (29.14)

Правила отбора и поляризации можно получить, исходя из формул (28.27)–(28.29).

$$\left. \begin{array}{c} \nearrow J+1 \\ J \rightarrow J \\ \searrow J-1 \end{array} \right\} \text{переходы разрешены.} \quad (29.15)$$

Переход $J = 0 \rightarrow J = 0$ запрещен.

¹См., например, Е. Кондон и Г. Шортли, *Теория атомных спектров*, ИЛ, 1949, стр. 373. — *Прим. ред.*

Разрешены такие переходы, при которых:

$$\begin{aligned}
 m \rightarrow m & \text{ — линейная поляризация излучения па-} \\
 & \text{раллельно полю,} \\
 m \rightarrow m + 1 & \text{ — круговая } \odot \text{ поляризация излучения} \\
 & \text{в плоскости, перпендикулярной полю,} \\
 m \rightarrow m - 1 & \text{ — круговая } \ominus \text{ поляризация излучения} \\
 & \text{в плоскости, перпендикулярной полю.}
 \end{aligned}
 \tag{29.16}$$

В двух последних случаях направления поляризации параллельны между собой и перпендикулярны главному магнитному моменту.

Запрет по четности разрешает переходы между состояниями:

$$\begin{aligned}
 \text{Четное} & \rightarrow \text{Нечетное,} \\
 \text{Нечетное} & \rightarrow \text{Четное.}
 \end{aligned}
 \tag{29.17}$$

Более слабые правила отбора:

$$S \rightarrow S, \quad \begin{array}{c} \nearrow L+1 \\ L \rightarrow L \\ \searrow L-1 \end{array}
 \tag{29.18}$$

(эти правила существенны главным образом для легких элементов).

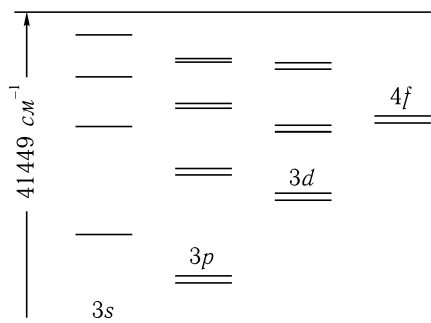
*Темы для обсуждения*¹:

1. Общие данные о структуре атома; экранировка.
2. Принцип Паули (как эмпирическое правило).
3. Атомные оболочки (таблица на следующей стр. 177).
4. Спектры атомов щелочных, щелочноземельных и других металлов; спектральные серии, спектры ионов.
5. Электроны и «дырки» в оболочке атома.
6. Сверхтонкая структура мультиплетов.

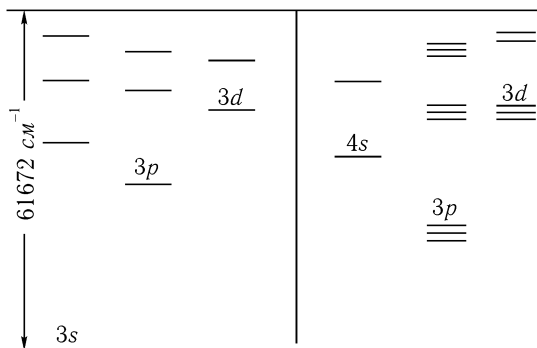
¹По этим темам будут полезны стандартные курсы квантовой механики, например курсы Л. Шиффа, Д. И. Блохинцева, а также двухтомная монография А. Зоммерфельда, *Строение атома и спектры* (М, 1956). Отдельные вопросы можно найти в простой книге Г. Семата, *Введение в атомную физику* (ИЛ, 1948). — *Прим. ред.*

Электронные оболочки атомов

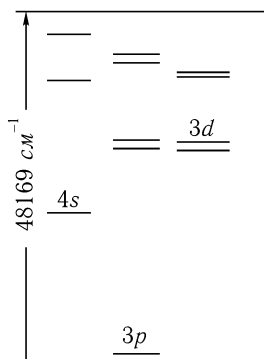
L	$n = 1$	$n = 2$		$n = 3$			$n = 4$				$n = 5$					$n = 6$						$n = 7$						
	K	L		M			N				O					P						Q						
	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4	0	1	2	3	4	5	0	1	2	3	4	5	6
1H	1																											
2He	2																											
3Li	2	1																										
4Be	2	2																										
5B	2	2	1																									
10Ne	2	2	6																									
11Na	2	2	6	1																								
12Mg	2	2	6	2																								
13Al	2	2	6	2	1																							
18Ar	2	2	6	2	6																							
19K	2	2	6	2	6		1																					
20Ca	2	2	6	2	6		2																					
29Cu	2	2	6	2	6	10	1																					
30Zn	2	2	6	2	6	10	2																					
31Ga	2	2	6	2	6	10	2	1																				
36Kr	2	2	6	2	6	10	2	6																				
37Rb	2	2	6	2	6	10	2	6			1																	
38Sr	2	2	6	2	6	10	2	6			2																	
47Ag	2	2	6	2	6	10	2	6	10		1																	
48Cd	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2																	
49In	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	1																
54Xe	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6																
55Cs	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6				1												
56Ba	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6				2												
79Au	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10			1												
80Hg	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10			2												
81Tl	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10			2	1											
86Rn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10			2	6											
87Fr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10			2	6					1						
88Ra	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10			2	6					2						
92U	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	3		2	6	1				2						
100Fm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	11		2	6	1				2						



Энергетические уровни натрия ($z = 11$). Дублетное расщепление для наглядности утрировано



Энергетические уровни магния ($z = 12$). Триплетное расщепление для наглядности утрировано



Энергетические уровни алюминия ($z = 13$). Расщепление для наглядности утрировано

Лекция 30

Системы тождественных частиц

Удобно начать со случая системы двух тождественных частиц. Тогда из самого понятия тождественности* следует, что волновая функция должна удовлетворять одному и тому же уравнению Шредингера при перемене частиц местами (при этом не изменяется также и собственное значение энергии):

$$\begin{aligned} H\psi(x_1, x_2) &= E\psi(x_1, x_2), \\ H\psi(x_2, x_1) &= E\psi(x_2, x_1). \end{aligned} \tag{30.1}$$

Ввиду эрмитовости гамильтониана в случае отсутствия вырождения по энергии (при данном E) можно заключить, что

$$\psi(x_1, x_2) = k\psi(x_2, x_1); \tag{30.2}$$

однако

$$\psi(x_1, x_2) = k\psi(x_2, x_1) = k^2\psi(x_1, x_2),$$

откуда следует, что

$$k^2 = 1, \quad k = \pm 1. \tag{30.3}$$

Имеем две возможности:

$k = +1$; тогда $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$ — симметричная волновая функция;	$\tag{30.4}$
$k = -1$; тогда $\psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$ — антисимметричная волновая функция.	

Когда собственное значение E вырождено, равенство (30.2) может и не выполняться. В этом случае, однако, вместо базисных функций $\psi(x_1, x_2)$, $\psi(x_2, x_1)$ можно взять их линейные комбинации:

либо $\psi(x_1, x_2) + \psi(x_2, x_1)$ — симметричная (по координатам тождественных частиц) комбинация,	$\tag{30.5}$
либо $\psi(x_1, x_2) - \psi(x_2, x_1)$ — антисимметричная (по координатам тождественных частиц) комбинация.	

Обе новые функции снова оказываются собственными функциями гамильтониана при том же значении энергии E , и картина совпадает с уже рассмотренной, однако новые функции обладают тем преимуществом, что автоматически оказываются ортогональными друг другу. Конечно, новые функции нетрудно нормировать.

Общий вывод:

Волновую функцию системы, состоящей из двух тождественных частиц, всегда можно выбрать симметричной либо антисимметричной относительно операции перестановки этих частиц. (30.6)

Теорема. Если волновая функция в начальный момент времени $\psi(x_1, x_2, 0)$ является симметричной (антисимметричной), то в любой другой момент времени t эта функция $\psi(x_1, x_2, t)$ сохраняет свои свойства симметрии. (30.7)

Доказательство.

Гамильтониан симметричен относительно перестановки тождественных частиц, поэтому функция $H\psi$ обладает той же симметрией, что и функция $\psi(x_1, x_2, 0)$.

$$\hat{H} \left\{ \begin{array}{l} \text{Симметричная функция} \\ \text{Антисимметричная} \\ \text{функция} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Симметричная функция} \\ \text{Антисимметричная} \\ \text{функция} \end{array} \right\}. \quad (30.8)$$

Таким образом, ясно, что производная волновой функции по времени

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi$$

также симметрична (антисимметрична) в тот момент, когда функция ψ симметрична (или соответственно антисимметрична). Следовательно, волновая функция сохранит свои свойства симметрии и в последующий момент $t + dt$, так как ее изменение определяется производной, взятой в момент времени t . Распространение этого доказательства на конечный интервал времени по методу индукции очевидно.

Существуют два различных типа элементарных частиц.

Постулат. Частицы одного типа (электроны, протоны, нейтроны, нейтрино и т. д.) описываются антисимметричными волновыми функциями; частицы же другого типа (фотоны, π -мезоны и т. д.) описываются симметричными волновыми функциями.

Таким образом,

$$\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_n) = \pm \psi(x_1, \dots, x_k, \dots, x_i, \dots, x_n), \quad (30.9)$$

где знак «+» берется для волновых функций фотонов, π -мезонов, ..., а знак «-» — для волновых функций электронов, протонов, нейтронов, ...

Важный факт. Паули показал, что частицы, описываемые антисимметричными волновыми функциями, имеют полуцелый спин, частицы, описываемые симметричными волновыми функциями, — целый спин. (30.10)

Исключения из этого правила неизвестны.

Рассмотрим сложную частицу (например, атом), состоящую из других частиц (например, из электронов, протонов и нейтронов).

Такая сложная «частица» имеет четность $(-1)^N$, где N — число антисимметричных частиц, входящих в данную сложную частицу. (30.11)

Примеры симметричных и антисимметричных «частиц»:

$$\left. \begin{array}{l} \text{атом водорода H} \\ \alpha\text{-частица} \\ d \text{ (дейтрон)} \end{array} \right\} \text{ — симметричные,}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{атом дейтерия} \\ \text{ядро трития} \\ \text{атом азота (N}^{14}\text{)} \end{array} \right\} \text{ — антисимметричные.}$$

Случай системы, состоящей из m независимых (не взаимодействующих между собой) частиц. Гамильтониан такой системы представляет собой сумму гамильтонианов отдельных частиц:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots + \hat{H}_m, \text{ где}$$

$\hat{H}_1$ действует на волновую функцию частицы 1,

$\hat{H}_2$ действует на волновую функцию частицы 2,

.....

$$\text{причем } \hat{H}_i = \frac{1}{2m_i} \hat{p}_i^2 + V_i(\mathbf{x}_i), \quad (i = 1, 2, \dots, m).$$

(30.12)

Не будем сначала предполагать, что *частицы*, составляющие систему, тождественны. Собственные функции этой системы, очевидно, выражаются как

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m) = \psi_1(\mathbf{x}_1) \psi_2(\mathbf{x}_2) \dots \psi_m(\mathbf{x}_m),$$

причем $E = E_1 + E_2 + \dots + E_m$.

Собственные значения энергий отдельных частиц задаются уравнениями

$$\hat{H}_i \psi_i(x_i) = E_i \psi_i(x_i).$$

(30.13)

Вывод. Собственные функции систем независимых частиц суть произведения собственных функций отдельных частиц; соответствующие собственные значения равны суммам собственных значений для отдельных частиц.

Теперь предположим, что частицы, составляющие систему, тождественны.

Тогда волновые функции всех состояний одной и той же системы, состоящей из тождественных частиц, должны иметь одинаковую симметрию; в противном случае волновая функция состояния, представляющего собой суперпозицию состояний различной симметрии, не будет ни симметричной, ни антисимметричной. Поскольку сначала предполагалось, что частицы, составляющие систему, *независимы* друг от друга, но в то же время *не тождественны*, то волновая функция такой системы не имеет в общем случае определенной симметрии.

Из этого следует, что собственные функции вида (30.13), вообще говоря, неприемлемы, так как

форма $\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \dots \psi_{n_m}(x_m)$ в общем случае ни симметрична, ни антисимметрична.

(30.14)

Функции вида (30.14) являются решениями уравнения

$$\hat{H} \psi = E \psi, \text{ где } E = \sum_{i=1}^m E_{n_i}. \quad (30.15)$$

Другие вырожденные решения, обладающие такой же энергией, получаются путем перестановок нижних индексов $n_1, n_2, \dots, n_m$ в (30.14). (Все перестановки индексов $n_1, n_2, \dots, n_m$ обозначим соответственно через $P_{n_1}, P_{n_2}, \dots, P_{n_m}$.) Тогда симметричное решение

строится по следующему рецепту:

$$\psi_{\text{sym}} = \sum_{(p)} \psi_{P_{n_1}}(x_1) \psi_{P_{n_2}}(x_2) \dots \psi_{P_{n_m}}(x_m), \quad (30.16)$$

где суммирование производится по всевозможным перестановкам, а нормировка будет указана ниже [см. (30.21)]. Рецепт же построения антисимметричного решения следующий:

$$\psi_{\text{antisym}} = \sum_{(p)} (-1)^P \psi_{P_{n_1}}(x_1) \psi_{P_{n_2}}(x_2) \dots \psi_{P_{n_m}}(x_m), \quad (30.17)$$

или, что то же,

$$\psi_{\text{antisym}} = \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \dots & \psi_{n_1}(x_m) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \dots & \psi_{n_2}(x_m) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{n_m}(x_1) & \psi_{n_m}(x_2) & \dots & \psi_{n_m}(x_m) \end{vmatrix} \quad (30.18)$$

(это детерминант, а не матрица!)¹. Нормировочный множитель к нему см. в формуле (30.22).

Волновые функции (30.16) или (30.17) выбираются соответственно типу частиц.

Принцип Паули. В случае антисимметричных частиц решение (30.18), очевидно, обращается в нуль, если состояния двух или более частиц, обозначаемые индексами $n_1, n_2, \dots, n_m$ совпадают. Следовательно, в случае таких частиц (электронов, протонов, нейтронов и т. д.) система не может находиться в таком состоянии, в котором (полностью определенные) состояния хотя бы двух входящих в нее тождественных частиц совпадают. (30.19)

Числа заполнения. Величины $N_1, N_2, \dots, N_s, \dots$, представляющие собой числа тождественных частиц, находящихся в индивидуальных состояниях $1, 2, \dots, s, \dots$, причем $N_1 + N_2 + \dots + N_s + \dots = m$ (общее число частиц) и называются числами заполнения. (30.20)

Сделаем теперь некоторые дополнительные замечания о волновых функциях.

¹Этот определитель называют также детерминантом Слэтера. — *Прим. ред.*

а. Частицы с симметричными волновыми функциями. Собственная функция (30.16) полностью определяется числами заполнения (30.20); следовательно, *задание чисел заполнения полностью определяет состояние системы*. Перепишем выражение для волновой функции (30.16) с нормировочным множителем:

$$\psi_{\text{sym}} = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots N_s! \dots}{m!}} \sum_{(p)} \psi_{P_{n_1}}(x_1) \psi_{P_{n_2}}(x_2) \dots \psi_{P_{n_m}}(x_m). \quad (30.21)$$

б. Частицы с антисимметричными волновыми функциями. Собственная функция (30.17) или (30.18) также полностью определяется числами заполнения (30.20), однако единственными возможными значениями этих чисел могут быть нуль и единица. Перепишем выражение для волновой функции (30.18) с нормировочным множителем:

$$\psi_{\text{antisym}} = \frac{1}{\sqrt{m!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \dots & \psi_{n_1}(x_m) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \dots & \psi_{n_2}(x_m) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{n_m}(x_1) & \psi_{n_m}(x_2) & \dots & \psi_{n_m}(x_m) \end{vmatrix}. \quad (30.22)$$

*Квантовая статистика** определяется свойствами частиц, образующих квантовомеханическую систему. Статистический вес состояния, определяемого числами заполнения (30.20), равен

В статистике Больцмана	$\frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_s!}$	$\left\{ \begin{array}{l} 1, \text{ если ни одно число} \\ \text{заполнения не превышает} \\ \text{1;} \\ 0, \text{ если какое-либо чис-} \\ \text{ло заполнения превышает} \\ \text{1.} \end{array} \right. \quad (30.23)$
В статистике Бозе – Эйнштейна	1	
В статистике Ферми – Дирака	1	

Рекомендуется обсудить вопрос о том, что по сравнению со статистикой Больцмана статистика Бозе–Эйнштейна благоприятствует накоплению частиц в одном и том же состоянии, а статистика Ферми–Дирака препятствует увеличению числа частиц в одном и том же состоянии.

Лекция 31

Двухэлектронная система (атом гелия)

Обозначим спиновые функции электронов через α и β :

$$\alpha = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} \text{ — спин } \uparrow, \quad \beta = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} \text{ — спин } \downarrow \quad (31.1)$$

[матрица α изображает ориентацию вектора спина «вверх» (в положительном направлении оси z), а матрица β — направление спина «вниз» (в отрицательном направлении оси z)]. Направление оси z обычно определяется либо направлением внешнего поля, либо ориентацией импульса частицы.

Спиновая волновая функция системы двух электронов получается перемножением спиновых функций отдельных электронов, например

$$\alpha(\xi_1)\beta(\xi_2) = \alpha\beta \quad (31.2)$$

и т. п., так что четыре спиновые функции

$$\alpha\alpha, \quad \alpha\beta, \quad \beta\alpha, \quad \beta\beta \quad (31.3)$$

составляют базис всевозможных двухэлектронных спиновых функций.

Переход к другому базису. Полный спин системы равен

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2. \quad (31.4)$$

Приведем матрицы $\hat{S}^2$ и $\hat{S}_z$ к диагональному виду

$$S^2 = \text{diag} \quad \text{и} \quad S_z = \text{diag}; \quad (31.5)$$

тогда, используя метод лекции 28 (либо непосредственно), получим характеристику различных спиновых состояний нашей системы:

Базисные функции	S^2	$ S $	S_z	Спины	Спиновая симметрия
$\alpha\alpha$	2	1	1	Параллельны	Симметричная
$(\alpha\beta + \beta\alpha)/\sqrt{2}$	2	1	0	—	—
$\beta\beta$	2	1	-1	—	—
$(\alpha\beta - \beta\alpha)/\sqrt{2}$	0	0	0	Антипараллельны	Антисимметричная

(31.6)

Отсюда видно, что когда

$$\text{Спины} \begin{cases} \text{параллельны,} \\ \text{антипарал-} \\ \text{лельны,} \end{cases} \quad \text{Спиновые функции} \begin{cases} \text{симметричны,} \\ \text{антисиммет-} \\ \text{ричны.} \end{cases} \quad (31.7)$$

С другой стороны, *полная* волновая функция системы двух электронов (включающая как обычную, так и спиновую часть) должна быть антисимметричной. Поэтому имеются следующие возможности выражения волновых функций двухэлектронной системы:

$$\left. \begin{aligned} \alpha\alpha u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), & \quad \frac{\alpha\beta + \beta\alpha}{\sqrt{2}} u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \\ \beta\beta u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), & \quad \frac{\alpha\beta - \beta\alpha}{\sqrt{2}} v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2); \end{aligned} \right\} \quad (31.8)$$

здесь $u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ — антисимметричная, $v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ — симметричная функции координат.

Случай I. Система двух независимых электронов. Гамильтониан такой системы можно записать в виде

$$\hat{H}_0 = \hat{H}(1) + \hat{H}(2). \quad (31.9)$$

Если спин-орбитальным взаимодействием пренебречь, то волновая функция одночастичной задачи находится из уравнения

$$\hat{H}(1)\psi_n(\mathbf{x}_1) = E_n\psi_n(\mathbf{x}_1). \quad (31.10)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Задача для одного электрона приводит здесь к дважды вырожденным решениям: $\alpha\psi_n(\mathbf{x}_1)$ и $\beta\psi_n(\mathbf{x}_2)$.

Следовательно, система, состоящая из двух электронов, имеет собственные значения энергии $E_n + E_m$, соответствующие следующим (вырожденным) полным волновым функциям:

$$\begin{aligned}
 & 1) \alpha\alpha \frac{\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_m(x_1)\psi_n(x_2)}{\sqrt{2}}, \\
 & 2) \frac{\alpha\beta + \beta\alpha}{\sqrt{2}} \frac{\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_m(x_1)\psi_n(x_2)}{\sqrt{2}}, \\
 & 3) \beta\beta \frac{\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_m(x_1)\psi_n(x_2)}{\sqrt{2}}, \\
 & 4) \frac{\alpha\beta - \beta\alpha}{\sqrt{2}} \frac{\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) + \psi_m(x_1)\psi_n(x_2)}{\sqrt{2}}.
 \end{aligned} \tag{31.11}$$

Функции 1–3 соответствуют спину $S = 1$ и предполагают пространственную антисимметрию и спиновую симметрию.

Функция 4 соответствует спину $S = 0$ и предполагает пространственную симметрию и спиновую антисимметрию.

Случай II. Кулоновское взаимодействие между электронами. Соответствующий гамильтониан имеет вид

$$H_c = \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} = \frac{e^2}{r_{12}}; \tag{31.12}$$

будем рассматривать его как возмущение (взаимодействие между двумя электронами считается слабым). В первом порядке теории возмущений добавка к энергии системы равна

$$\delta E_c = \overline{H_c} - \iint \sum_{\text{Спин}} d^3x_1 d^3x_2 \left| \frac{\text{Волновая}}{\text{функция}} \right|^2 \frac{e^2}{r_{12}}. \tag{31.13}$$

Спиновым состояниям $S = 1$ (триплетное состояние) и $S = 0$ (синглетное состояние) соответствуют различные значения δE_c . При этом недиагональные члены в матрице гамильтониана отсутствуют. Считая функции ψ_1 и ψ_2 вещественными, находим:

$$\begin{aligned}
 \delta E_c = & \iint \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_1(x_1)|^2 |\psi_2(x_2)|^2 d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \mp \\
 & \mp \iint \frac{e^2}{r_{12}} \psi_1(x_1) \psi_2(x_1) \psi_1(x_2) \psi_2(x_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2; \tag{31.14}
 \end{aligned}$$

знак «минус» соответствует триплетному состоянию системы, знак «плюс» — синглетному. Первый интеграл справа интерпретируется как *энергия электростатического взаимодействия* двух электронов; второй интеграл представляет собой специфически квантовую, так называемую *обменную энергию*.

Темы для обсуждения в связи с формулой (31.14):

1. Обменный интеграл как эффективное очень сильное спинспинное взаимодействие.
2. Связь с теорией ферромагнетизма.
3. Роль спин-орбитального взаимодействия и триплетного расщепления уровней.

Спектры гелия (термы даны в см^{-1})

Парагелий (синглет)	$1s^2$	$^1S_0 = 198305$	$2p\ 1s$	$^1P_0 = 27176$
	$2s\ 1s$	$^1S_0 = 32033$	$3d\ 1s$	$^1P_0 = 12206$
	$3s\ 1s$	$^1S_0 = 19446$		
Ортогелий (триплет)	$2s\ 1s$	$^3S_1 = 38455$	$2p\ 1s$	$^3P_0 = 29223,87$
	$3s\ 1s$	$^3S_1 = 15074$	$2p\ 1s$	$^3P_1 = 29223,799$
			$2p\ 1s$	$^3P_2 = 29223,878$

Если при расчете воспользоваться методом Ритца (см. лекцию 21), взяв в качестве пробной функции $\exp[-\alpha(r_1 + r_2)/a]$, то вариационный параметр будет равен $\alpha = 27/16$. При этом основному уровню соответствует значение $[2 \cdot (27^2/16^2) - 4] \cdot R = 186000\ \text{см}^{-1}$ (R — постоянная Ридберга)*.

ЛЕКЦИЯ 32

Молекула водорода

Электронные уровни молекулы водорода. Будем считать ядра a и b двух атомов водорода покоящимися на расстоянии $r_{ab} = r$ друг от друга. Обозначим: $\mathbf{r}_{a1}$ и $\mathbf{r}_{b1}$ — радиус-векторы первого электрона относительно ядер a и b , $\mathbf{r}_{a2}$ и $\mathbf{r}_{b2}$ — радиус-векторы второго электрона относительно ядер a и b , $\mathbf{r}_{12}$ — радиус-вектор второго электрона относительно первого (рис. 25). Тогда гамильтониан системы можно записать как

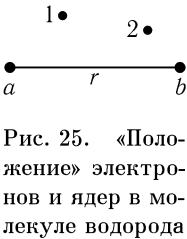


Рис. 25. «Положение» электронов и ядер в молекуле водорода

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2}{2m} + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{b2}}. \quad (32.1)$$

Метод Гайтлера–Лондона.

Гайтлер и Лондон предложили идею объяснения гомеополярной химической связи, исходя из соображений минимума энергии. Они показали, что минимальная по энергии комбинация волновых функций невозмущенной задачи правильно описывает свойства молекулы водорода, что после усовершенствования расчетов явилось большим триумфом квантовой механики.

Рассмотрим две волновые функции нулевого приближения (систему двух *невозмущенных* атомов водорода)

$$\psi = a(1)b(2) \pm a(2)b(1), \quad (32.2)$$

где знак «плюс» соответствует $S = 0$ (синглет), знак «минус» соответствует $S = 1$ (триплет); $a(1)$ и $b(1)$ представляют собой волновые функции атома водорода для первого электрона, движущегося около ядра a или b соответственно; $a(2)$ и $b(2)$ — аналогичные волновые функции второго электрона.

Произведем прежде всего нормировку волновых функции (32.2):

$$\begin{aligned} \int \psi^2 d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 &= \left(\int a^2(1) d\mathbf{x}_1 \right) \left(\int b^2(2) d\mathbf{x}_2 \right) + \left(\int a^2(2) d\mathbf{x}_2 \right) \times \\ &\times \left(\int b^2(1) d\mathbf{x}_1 \right) \pm 2 \int a(1)b(1) d\mathbf{x}_1 \int a(2)b(2) d\mathbf{x}_2 \equiv 2(1 + \beta^2), \end{aligned} \quad (32.3)$$

где

$$\beta = \int a(1)b(1) d\mathbf{x}_1. \quad (32.4)$$

Нормированные волновые функции (32.2) принимают вид

$$\psi_{\pm} = \frac{a(1)b(2) \pm a(2)b(1)}{\sqrt{2(1 \pm \beta^2)}}. \quad (32.5)$$

Отсюда, как обычно в теории возмущений, находим энергию системы в первом приближении:

$$E_{\pm} = \iint \psi_{\pm}^* \hat{H} \psi_{\pm} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2. \quad (32.6)$$

Чтобы выразить эту энергию явно, воспользуемся уравнениями вида

$$\left(\frac{1}{2m} p_1^2 - \frac{e^2}{r_{12}} \right) a(1) = -R a(1), \quad (32.7)$$

где R — постоянная Ридберга, равная в единицах энергии 13,6 эв; получим:

$$\hat{H} a(1)b(2) = \left(-2R + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) a(1)b(2). \quad (32.8)$$

Окончательное выражение для энергии (32.6) имеет вид

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= -2R + \frac{e^2}{r} + \frac{1}{1 \pm \beta^2} \iint \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) a^2(1) b^2(2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \pm \\ &\pm \frac{1}{1 \pm \beta^2} \iint \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) a(1)b(1)a(2)b(2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2. \end{aligned} \quad (32.9)$$

Обсуждение. Рассматривая здесь член $-2R$ как нулевую энергию (суммарную энергию системы двух пространственно разделенных атомов), можно интерпретировать член e^2/r как потенциальную энергию

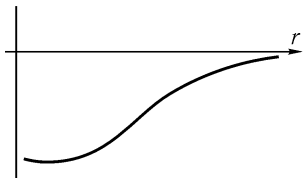


Рис. 26. График обменного интеграла как функции r

ядер, а первый двойной интеграл в выражении (32.9) (не считая малой величины β) — как энергию электростатического взаимодействия двух электронных облаков $ea^2(1)$ и $eb^2(2)$ между собой и с дополнительным ядром (вторым ядром для первого электронного облака и первым — для второго). Второй двойной интеграл есть обменный интеграл. Он представляет собой отрицательную величину (его зависимость от расстояния между ядрами изображена на рис. 26).

В сумме эти члены дают (в зависимости от знака при обменном интеграле) энергии E_- и E_+ , принципиально различным образом зависящие от r (см. рис. 27).

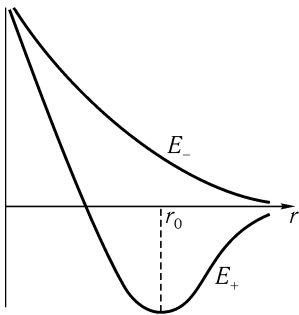


Рис. 27

Ясно, что состояние молекулы водорода, характеризуемое в первом приближении энергией E_- , не может быть связанным, в то время как состояние, соответствующее энергии E_+ , устойчиво (атомы действительно связаны в одну молекулу), причем из рис. 27 можно составить наглядное представление о равновесном расстоянии r_0 между ядрами двух атомов водорода в молекуле H_2 . Следовательно, в основном состоянии молекулы H_2 спины двух электронов могут быть только *противоположными* $S = 0$.

Метод Уонга. Метод Гайтлера–Лондона, схематически изложенный выше, приводит к количественно неудовлетворительным результатам. Основное состояние молекулы водорода может быть более успешно рассчитано по методу Уонга, использовавшего пробную функцию (по Ритцу) вида

$$\psi(x_1, x_2) = e^{-\frac{z}{a}(r_{a1}+r_{b2})} + e^{-\frac{z}{a}(r_{b1}+r_{a2})}, \quad (32.10)$$

где a — боровский радиус, z — варьируемый параметр Ритца.

Исследуя на минимум среднюю энергию

$$\bar{H} = \frac{\int \psi(x_1, x_2) \hat{H} \psi(x_1, x_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2}{\int |\psi(x_1, x_2)|^2 d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2} \quad (32.11)$$

при каждом значении r , находим, как обычно, соответствующие значения параметра z . Результаты вычислений и сравнение их с экспериментальными данными имеют вид

	Расчет по методу Уонга	Эксперимент	(32.12)
Энергия связи ...	0,278R	0,326R	
Момент инерции ...	$0,459 \cdot 10^{-40}$	$0,467 \cdot 10^{-40}$	
Частота (см^{-1}) ...	4900	4360	

Вращательные уровни и роль ядерного спина. При определении вращательных энергетических уровней значительную роль играет спин ядер. Приближенный вид чисто вращательного гамильтониана [см. (2.14)]

$$-\frac{\hbar^2}{2A} \Lambda \quad (32.13)$$

приводит к следующим результатам для вращательных уровней:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2A} l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (32.14)$$

$$\psi_l = Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Полученные значения энергии реализуются лишь в случае, когда в двухатомных молекулах результирующий момент электронов относительно оси симметрии молекулы H_2 равен нулю. При этом, однако, возникают некоторые усложнения, если входящие в молекулу атомные ядра одинаковы.

ПРИМЕР. Два одинаковых ядра, ядерный спин S каждого из которых равен нулю, подчиняющиеся статистике Бозе–Эйнштейна, требуют симметричной волновой функции. Однако функция $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ симметрична относительно перестановки ядер только тогда, когда число l четное, поэтому все нечетные значения квантового числа l должны отсутствовать. (Усложнения могут возникнуть в случае симметрии между электронными уровнями.) В молекуле водорода оба протона

имеют спины, равные $\frac{1}{2}$, и описываются антисимметричными волновыми функциями. Поэтому, как и в системе с двумя электронами (атом гелия), вращательные термы разделяются на

параводородные термы, для которых спины ядер антипараллельны, причем $l = 0, 2, 4, \dots$;

ортоводородные термы, для которых спины ядер параллельны, причем $l = 1, 3, 5, \dots$.

Замечания и темы для обсуждения:*

1. Соотношение интенсивностей вращательных полос и очень медленные (пара $\rightleftharpoons$ орто)-переходы в водороде.
2. Теплосмкости вращательных степеней свободы в водороде.
3. Полосатые спектры двухатомных молекул.

Лекция 33

Теория столкновений

Рассеяние на короткодействующем центральном потенциале. В этом случае естественно задаться следующим асимптотическим (при $r \rightarrow \infty$) видом волновой функции:

$$\psi \rightarrow e^{ik \cdot z} - f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (33.1)$$

где

$$k = \frac{1}{\hbar} p. \quad (33.2)$$

Первый член (33.1) описывает плоскую падающую волну, распространяющуюся в положительном направлении оси z ; эта волна соответствует первоначальному потоку частиц, обладающих определенным значением импульса p . Второе слагаемое, имеющее вид радиально расходящейся волны, соответствует потоку рассеянных частиц.

Формула (33.1) приводит к следующему выражению для дифференциального сечения:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = |f(\theta)|^2 \quad (d\omega \text{ — элемент телесного угла}). \quad (33.3)$$

Разложим падающую волну в (33.1) в ряд по сферическим функциям:

$$e^{ik \cdot z} = \frac{\pi\sqrt{2}}{\sqrt{kr}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{2l+1} Y_{l,0}(\theta) J_{l+1/2}(k \cdot r). \quad (33.4)$$

Этот прием напрашивается ввиду центральной симметрии рассеивающего поля; вместе с тем ввиду существования выделенного направления (в падающей волне $k \parallel Oz$) на картину рассеяния накладывается аксиальная (цилиндрическая) симметрия, ответственная в разложении (33.4) за появление функций Бесселя $J_{l+1/2}(k \cdot r)$.

Используя асимптотику функций Бесселя

$$J_n(x) \rightarrow \left(\sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi n}{2} \right),$$

придем к выражению

$$e^{ikz} \rightarrow \sqrt{\frac{4\pi}{kr}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{2l+1} Y_{l,0} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right) = \frac{\sin kr}{kr} + \dots \quad (33.5)$$

(в волновой функции представляет интерес лишь асимптотика, так как рассеяние исследуется на больших расстояниях от центра).

Разложим по сферическим функциям также функцию $f(\theta)$:

$$f(\theta) = \sum_l a_l P_l(\cos \theta) = \sqrt{4\pi} \sum_l \frac{a_l}{\sqrt{2l+1}} Y_{l,0}(\theta). \quad (33.6)$$

Подставив найденные разложения в формулу (33.1), получим:

$$\begin{aligned} \psi \rightarrow \frac{\sqrt{4\pi}}{kr} \sum_l \frac{Y_{l,0}}{\sqrt{2l+1}} \left\{ e^{ik \cdot r} \left[-a_l - \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} \right] + \right. \\ \left. + e^{-ik \cdot r} (-1)^l \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} \right\}. \quad (33.7) \end{aligned}$$

Заметим, что сходящаяся и расходящаяся волны должны иметь равные амплитуды (сохранение числа частиц). Из этого условия следует, что

$$a_l + \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} = e^{2i\alpha_l} \left(\frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} \right), \quad (33.8)$$

или

$$a_l = \frac{i}{2} \frac{2l+1}{k} (e^{2i\alpha_l} - 1). \quad (33.9)$$

(Здесь путем введения вещественной величины α_l учтена возможность различия фазы волн; в дальнейшем будем называть α_l *фазовым сдвигом* или разностью фаз, соответствующих данному значению l .) Радиальная волновая функция при этом должна зависеть от l и иметь вид

$$R_l = u_l(r)/r,$$

где асимптотически

$$u_l(r) \rightarrow \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \alpha_l \right). \quad (33.10)$$

Очевидно, разности фаз α_l полностью определяют картину рассеяния; в частности, дифференциальное сечение обращается в нуль, если все фазы α_l равны 0 или π .

Для определения сдвига фаз α_l воспользуемся радиальным уравнением Шредингера в форме

$$\begin{aligned} u_l''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] u_l &= 0, \\ E &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \end{aligned} \quad (33.11)$$

или

$$u_l'' + \left\{ k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} u_l = 0. \quad (33.12)$$

Решение уравнения (33.12) ведет себя при малых значениях r как

$$u_l(r) \sim r^{l+1},$$

при больших r как

$$u_l(r) \approx \text{const} \cdot \sin \left(kr + \alpha_l - \frac{\pi l}{2} \right);$$

поведением решения (33.12) и определяются сдвиги фаз α_l .

Выразим $d\sigma/d\omega$ через фазы α_l , используя формулы (33.9), (33.6) и (33.3):

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\alpha_l} - 1) \right|^2; \quad (33.14)$$

интегрируя это выражение, получим полное сечение рассеяния (рис. 28)

$$\sigma = 4\pi \lambda^2 \sum_l (2l+1) \sin^2 \alpha_l. \quad (33.15)$$

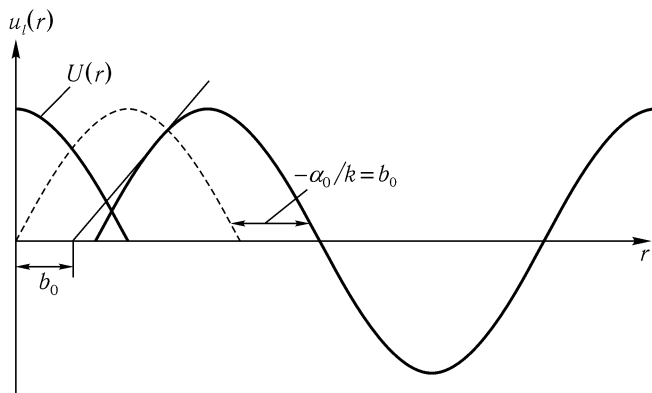


Рис. 28. Поведение волновой функции в присутствии рассеивающего центра

При малых энергиях достаточно знать величину α_0 ($l = 0$). В этом случае

$$\alpha_0 = -k \times \text{Длина рассеяния} = -kb_0. \quad (33.16)$$

Тогда полное сечение принимает вид

$$\sigma \rightarrow 4\pi b^2. \quad (33.17)$$

Можно показать, что в простейших случаях при малых энергиях

$$\alpha_l \sim k^{2l+1}.$$

Темы для обсуждения:

В качестве примеров полезно рассмотреть:

1. Рассеяние на кулоновском потенциале (см. у Шиффа, § 20).
2. Рассеяние на идеально твердой сфере и эффект теневой области (см. там же, стр. 132).
3. Рассеяние с поглощением¹.

¹Для рассеяния с поглощением доказывается «оптическая теорема» (см. курс Блохинцева, стр. 275, 276). — *Прим. ред.*

Лекция 34

Теория свободного электрона Дирака

Релятивистское волновое уравнение. Общее уравнение Шредингера (зависящее от времени) для частицы массой m

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right)$$

в высшей степени несимметричным образом включает координаты t, x, y, z . Это обстоятельство явно противоречит традиционным требованиям частной теории относительности, и в целях обобщения нерелятивистского уравнения Шредингера на случай частиц больших (сравнимых с c) скоростей проведем следующее исследование: попытаемся найти такое релятивистское уравнение для электрона, которое включало бы производные только первого порядка по t, x, y, z . Введем стандартные обозначения:

$$\begin{aligned} x &= x_1, & y &= x_2, & z &= x_3, & ict &= x_4 & (ct &= x_0), \\ p_x &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} & \text{или} & & p_i &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}, \\ p_4 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_4} = -\frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} = \frac{i}{c} E. \end{aligned} \quad (34.1)$$

В последней строке использовано операторное выражение $[E = i\hbar(\partial/\partial t)]$. Итак, вместо трехмерных векторов

$$\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, x_3), \quad \mathbf{p} \equiv (p_1, p_2, p_3) \quad (34.2)$$

введем четырехмерные векторы (4-векторы)

$$\vec{x} \equiv (x_1, x_2, x_3, x_4), \quad \vec{p} \equiv (p_1, p_2, p_3, p_4). \quad (34.3)$$

Если бы волновая функция ψ была скаляром, то простейшее уравнение первого порядка имело бы вид (коэффициенты $a^{(\mu)}$ считаются постоянными)

$$\mathcal{H}\psi = a^{(1)} \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + a^{(2)} \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + a^{(3)} \frac{\partial \psi}{\partial x_3} + a^{(4)} \frac{\partial \psi}{\partial x_4} = \frac{i}{\hbar} a^{(\mu)} p_\mu \psi;$$

здесь и далее используется правило суммирования Эйнштейна по повторяющимся индексам от 1 до 4. Оказывается, однако, что волновую функцию ψ необходимо выбрать такой, чтобы она имела *несколько* компонент (именно *четыре*.) Вместо записанного уравнения для ψ тогда следует составить другое уравнение:

$$imc\psi_k = \gamma_{kl}^{(\mu)} \hat{p}_\mu \psi_l = \frac{\hbar}{i} \gamma_{kl}^{(\mu)} \frac{\partial \psi_l}{\partial x_\mu}. \quad (34.4)$$

Уравнение Дирака. Матрицы Дирака. В матричных обозначениях ψ представляет собой вертикальный столбец, состоящий из четырех элементов, а матрица $\gamma_\mu = \|\gamma_{kl}^{(\mu)}\|$ квадратная и состоит из четырех строк и четырех столбцов (4×4 -матрица).

Таким образом, получаем матричное линейное дифференциальное уравнение первого порядка (по μ — суммирование):

$$imc\psi = \gamma_\mu \hat{p}_\mu \psi = \frac{\hbar}{i} \gamma_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu}, \quad (34.5)$$

называемое уравнением Дирака. Дифференциальные операторы

$$\hat{p}_\mu = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu}$$

действуют на волновую функцию-столбец ψ , зависящую от всех координат x_μ , а матрицы γ_μ следует толковать как операторы, относящиеся к внутренней переменной, подобной спиновой переменной Паули, однако имеющей, как выяснится, четыре компоненты.

Следовательно, матрицы γ_μ должны коммутировать с операторами 4-импульса $\hat{p}_\nu$ и с координатами x_ν

$$[\gamma_\mu, \hat{p}_\nu] = [\gamma_\mu, x_\nu] = 0.$$

(34.6)

Из равенства (34.5) следует, что

$$(imc)^2 \psi = (\gamma_\mu \hat{p}_\mu)^2 \psi$$

или [символически опуская ψ , используя соотношения (34.1), (34.6) и очевидное равенство $p_4^2 = -E^2/c^2$]

$$-m^2 c^2 = \gamma_1^2 p_1^2 + \gamma_2^2 p_2^2 + \gamma_3^2 p_3^2 - \gamma_4^2 \frac{E^2}{c^2} +$$

+ $(\gamma_1 \gamma_2 + \gamma_2 \gamma_1) p_1 p_2$ + аналогичные члены.

Последнее соотношение можно отождествить с известным релятивистским соотношением между импульсом и энергией

$$m^2 c^2 + p^2 = \frac{E^2}{c^2}, \quad (34.7)$$

если постулировать, что

$$\begin{aligned} \gamma_1^2 = \gamma_2^2 = \gamma_3^2 = \gamma_4^2 = 1, \\ \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 0 \quad \text{при } \mu \neq \nu. \end{aligned} \quad (34.8)$$

Как можно показать, наиболее низкий порядок матриц, при котором выполняются условия (34.8), равен 4. Ограничиваясь 4×4 -матрицами, можно построить много вариантов набора $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$, по существу эквивалентных. Выберем «стандартную» систему:

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & -i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{vmatrix}, \\ \gamma_2 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ i\sigma_2 & 0 \end{vmatrix}, \\ \gamma_3 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & -i\sigma_3 \\ i\sigma_3 & 0 \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (34.9)$$

и

$$\beta = \gamma_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (34.10)$$

Тройка $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ во многих отношениях ведет себя как компоненты вектора; удобны обозначения:

$$\text{«вектор» } \gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3), \text{ аналог 4-вектор } \vec{\gamma} \equiv (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4). \quad (34.11)$$

В этих обозначениях уравнение (34.5) принимает вид

$$imc\psi = \left(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} + \frac{i}{c} E \gamma_4 \right) \psi = \vec{\gamma} \cdot \vec{p} \psi. \quad (34.12)$$

Умножим это уравнение слева на матрицу $\gamma_4 = \beta$ и используем свойство $\gamma_4^2 = \beta^2 = 1$; получим эквивалентное уравнение

$$\boxed{E\psi = (mc^2\beta + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})\psi}, \quad (34.13)$$

(другая запись уравнения Дирака), где введена тройка матриц

$$\boldsymbol{\alpha} = i\beta\boldsymbol{\gamma} \quad \text{или} \quad \alpha_1 = i\beta\gamma_1, \quad \alpha_2 = i\beta\gamma_2, \quad \alpha_3 = i\beta\gamma_3. \quad (34.14)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{vmatrix}, \\ \alpha_3 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (34.15)$$

Свойства введенных матриц (проверяемые непосредственно):

$$\beta^2 = \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = 1; \quad (34.16)$$

$$\begin{aligned} \beta\alpha_1 + \alpha_1\beta &= 0, & \beta\alpha_2 + \alpha_2\beta &= 0, & \beta\alpha_3 + \alpha_3\beta &= 0, \\ \alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1 &= 0, & \alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_2 &= 0, & \alpha_3\alpha_1 + \alpha_1\alpha_3 &= 0, \end{aligned} \quad (34.17)$$

т. е. квадраты матриц β и $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ равны единичным матрицам;
матрица β и все матрицы α антикоммутируют друг с другом;
матрица β и все матрицы α эрмитовы. (34.18)

Можно показать, что физические следствия, вытекающие из уравнения (34.13), не зависят от способа выбора системы матриц $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$

и β , имеющих в частном случае вид (34.15) и (34.10). Иными словами, все следствия, вытекающие из теории, останутся прежними при переходе к другой системе 4×4 -матриц, если только матрицы новой системы также имеют свойства (34.18). В частности, с помощью унитарного преобразования можно прийти к такому представлению, в котором прежние четыре матрицы поменяются ролями. Таким образом, их различие является лишь кажущимся.

Рекомендуется проверить, что собственные значения каждой из матриц

$$\gamma_4 = \beta, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3 \quad (34.19)$$

равны $+1$ и -1 , причем оба эти значения *дважды вырождены*.

Уравнение (34.13) можно записать в виде

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (34.20)$$

где

Оператор $\hat{H}$ должен, очевидно, интерпретироваться как гамильтониан: $H = mc^2\beta - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$. (34.21)

Не зависящее от времени уравнение Шредингера для спинорной волновой функции

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

распадается на четыре «зацепляющихся» уравнения

$$\begin{aligned} E\psi_1 &= mc^2\psi_1 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_4}{\partial x} - i \frac{\partial\psi_4}{\partial y} + \frac{\partial\psi_3}{\partial z} \right\}, \\ E\psi_2 &= mc^2\psi_2 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_3}{\partial x} + i \frac{\partial\psi_3}{\partial y} - \frac{\partial\psi_4}{\partial z} \right\}, \\ E\psi_3 &= -mc^2\psi_3 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_2}{\partial x} - i \frac{\partial\psi_2}{\partial y} + \frac{\partial\psi_1}{\partial z} \right\}, \\ E\psi_4 &= -mc^2\psi_4 + \frac{c\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial\psi_1}{\partial x} + i \frac{\partial\psi_1}{\partial y} - \frac{\partial\psi_2}{\partial z} \right\}. \end{aligned} \quad (34.22)$$

Нетрудно записать также уравнение Шредингера с зависимостью от времени, воспользовавшись заменой

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

Решение с плоской волной. Волновая функция свободного электрона должна, очевидно, представлять собой плоскую волну:

$$\psi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}, \quad (34.23)$$

где спинорные компоненты u_1, u_2, u_3, u_4 постоянны, а компоненты вектора $\mathbf{p}$ — просто числа.

Подставим функцию (34.23) в уравнение (34.22); разделив левую и правую части на общий множитель $e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$, получим систему алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} Eu_1 &= mc^2 u_1 + c(p_x - ip_y)u_4 + cp_z u_3, \\ Eu_2 &= mc^2 u_2 + c(p_x + ip_y)u_3 - cp_z u_4, \\ Eu_3 &= -mc^2 u_3 + c(p_x - ip_y)u_2 + cp_z u_1, \\ Eu_4 &= -mc^2 u_4 + c(p_x + ip_y)u_1 - cp_z u_2, \end{aligned} \quad (34.24)$$

однородную относительно четырех неизвестных постоянных u_i . Такая система имеет решения, только если детерминант из коэффициентов при неизвестных равен нулю. Детерминант (34.24) приводится к виду

$$(E^2 - m^2 c^4 - c^2 p^2)^2,$$

откуда следуют дважды вырожденные собственные значения E :

$$\begin{aligned} E &= +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}, \\ E &= -\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}. \end{aligned} \quad (34.25)$$

Таким образом, каждому данному значению импульса $\mathbf{p}$ соответствует дважды вырожденное значение $E = +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$ и дважды вырожденное значение $E = -\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$.

Лекция 33

Теория столкновений

Рассеяние на короткодействующем центральном потенциале. В этом случае естественно задаться следующим асимптотическим (при $r \rightarrow \infty$) видом волновой функции:

$$\psi \rightarrow e^{ik \cdot z} - f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (33.1)$$

где

$$k = \frac{1}{\hbar} p. \quad (33.2)$$

Первый член (33.1) описывает плоскую падающую волну, распространяющуюся в положительном направлении оси z ; эта волна соответствует первоначальному потоку частиц, обладающих определенным значением импульса p . Второе слагаемое, имеющее вид радиально расходящейся волны, соответствует потоку рассеянных частиц.

Формула (33.1) приводит к следующему выражению для дифференциального сечения:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = |f(\theta)|^2 \quad (d\omega \text{ — элемент телесного угла}). \quad (33.3)$$

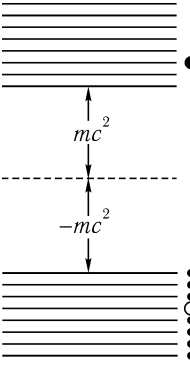
Разложим падающую волну в (33.1) в ряд по сферическим функциям:

$$e^{ik \cdot z} = \frac{\pi\sqrt{2}}{\sqrt{kr}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{2l+1} Y_{l,0}(\theta) J_{l+1/2}(k \cdot r). \quad (33.4)$$

Этот прием напрашивается ввиду центральной симметрии рассеивающего поля; вместе с тем ввиду существования выделенного направления (в падающей волне $k \parallel Oz$) на картину рассеяния накладывается аксиальная (цилиндрическая) симметрия, ответственная в разложении (33.4) за появление функций Бесселя $J_{l+1/2}(k \cdot r)$.

ную энергию), то в «море» возникнет «дырка» с $E > 0$ и зарядом, противоположным заряду электрона (*позитрон*) (рис. 29). Импульсу и энергии позитрона соответствуют $-\mathbf{p}$ и $-E > 0$ «дырочного» состояния.

Тогда волновые функции



$$\begin{aligned} u^{(1)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} & \text{ описывают электронные состояния} \\ & \text{ с ориентацией спина} \\ u^{(2)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} & \text{ «вверх» и «вниз»} \end{aligned} \quad (34.28)$$

с импульсом $\mathbf{p}$ и энергией $+\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}$, а волновые функции

$$\begin{aligned} u^{(3)} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} & \text{ описывают позитронные со-} \\ & \text{ стояния с ориентацией спи-} \\ u^{(4)} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} & \text{ на} \end{aligned} \quad (34.29)$$

«вверх» и «вниз»

Рис. 29

с импульсом $-\mathbf{p}$ и энергией $-\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}$.

Если задана функция

$$\psi = u e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}},$$

где u — четырехкомпонентный спинор, то полезно сконструировать также два оператора $\widehat{\mathcal{P}}$ и $\widehat{\mathcal{N}}$ — операторы проектирования — так, чтобы произведение $\widehat{\mathcal{P}}\psi$ содержало только обычные электронные волновые функции, а $\widehat{\mathcal{N}}\psi$ — только электронные волновые функции отрицательной энергии, соответствующие позитронным состояниям.

Операторы проектирования спиноров $\widehat{\mathcal{P}}$ и $\widehat{\mathcal{N}}$ определяются равенствами

$$\widehat{\mathcal{P}}u^{(1)} = u^{(1)}, \quad \widehat{\mathcal{P}}u^{(2)} = u^{(2)}, \quad \widehat{\mathcal{P}}u^{(3)} = 0, \quad \widehat{\mathcal{P}}u^{(4)} = 0; \quad (34.30)$$

$$\widehat{\mathcal{N}}u^{(1)} = 0, \quad \widehat{\mathcal{N}}u^{(2)} = 0, \quad \widehat{\mathcal{N}}u^{(3)} = u^{(3)}, \quad \widehat{\mathcal{N}}u^{(4)} = u^{(4)}. \quad (34.31)$$

Эти свойства однозначно определяют вид операторов $\widehat{\mathcal{P}}$ и $\widehat{\mathcal{N}}$. Заметим, что

$$Hu^{(1)} = Ru^{(1)}, \quad Hu^{(2)} = Ru^{(2)}, \quad Hu^{(3)} = -Ru^{(3)}, \quad Hu^{(4)} = -Ru^{(4)},$$

где

$$R = +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}.$$

Здесь $\mathbf{p}$ есть c -вектор (т. е. вектор, все компоненты которого c -числа), а $\hat{H}$ — гамильтониан (34.21). Тогда

$$\hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2R} \hat{H}, \quad \hat{\mathcal{N}} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2R} \hat{H}. \quad (34.32)$$

Момент импульса электрона. Особый интерес представляет метод введения момента импульса электрона. Используя гамильтониан (34.21), можно записать

$$[\hat{H}, \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x] = \frac{\hbar c}{i} (\hat{\alpha}_1 \hat{p}_y - \hat{\alpha}_2 \hat{p}_x) \neq 0; \quad (34.33)$$

следовательно, для свободного дираковского электрона обычная комбинация $x p_y - y p_x$ не постоянна во времени. Однако легко проверить, что величина

$$\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x + \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2 \equiv \hbar \hat{J}_z \quad (34.34)$$

коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$. Поэтому ее следует интерпретировать как компоненту вектора момента импульса. Оператор же вектора момента может быть тогда записан в виде

$$\hbar \hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{2i} \begin{Bmatrix} \hat{\alpha}_2 \cdot \hat{\alpha}_3 \\ \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_1 \\ \hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_2 \end{Bmatrix} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}', \quad (34.35)$$

где первый член справа представляет собой орбитальную часть момента, а второй — спиновую часть, описываемую матрицами

$$\hat{\sigma}'_x = \frac{1}{i} \hat{\alpha}_2 \cdot \hat{\alpha}_3 = \begin{Bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{Bmatrix}, \quad \hat{\sigma}'_y = \frac{1}{i} \hat{\alpha}_3 \cdot \hat{\alpha}_1 = \begin{Bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{Bmatrix},$$

$$\hat{\sigma}'_z = \frac{1}{i} \hat{\alpha}_1 \cdot \hat{\alpha}_2 = \begin{Bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{Bmatrix}. \quad (34.36)$$

Здесь бросается в глаза сходство 4×4 -матриц $\widehat{\sigma}'$ с уже известными 2×2 -матрицами Паули $\widehat{\sigma}$. Действительно, можно записать

$$\widehat{\sigma}' = \begin{vmatrix} \widehat{\sigma} & 0 \\ 0 & \widehat{\sigma} \end{vmatrix}, \text{ где } 0 = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \text{ — нулевая } 2 \times 2\text{-матрица;}$$

Действуя матрицей $\widehat{\sigma}'$ на спинор u , получим:

$$\widehat{\sigma}' u = \begin{vmatrix} \widehat{\sigma} \cdot \begin{vmatrix} u_1 \\ u_2 \end{vmatrix} \\ \widehat{\sigma} \cdot \begin{vmatrix} u_3 \\ u_4 \end{vmatrix} \end{vmatrix},$$

т.е. операторы спина Паули действуют при этом по отдельности на первую и вторую пары компонент 4-спинора; следовательно, каждой паре компонент могут соответствовать оба значения спина ($\uparrow$ и $\downarrow$).

Лекция 35

Электрон Дирака в электромагнитном поле

Введем обозначения:

$\mathbf{A} \equiv (A_1, A_2, A_3)$ — векторный потенциал,

$\varphi = \frac{1}{i} A_4$ — скалярный потенциал, (35.1)

$\vec{A} \equiv (A_1, A_2, A_3, A_4)$ — четырехмерный потенциал электромагнитного поля;

$F_{ik} = \frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k}$ — антисимметричный тензор напряженности электромагнитного поля; (35.2)

$(F_{12}, F_{23}, F_{31}) \equiv \mathbf{B}$ — индукция магнитного поля;
 $(F_{41}, F_{42}, F_{43}) \equiv i\mathbf{E}$, где $\mathbf{E}$ — напряженность электрического поля. (35.3)

Взаимодействие электронов и позитронов с электромагнитным полем может быть включено в уравнение Дирака (34.12) или (34.20)–(34.21), если воспользоваться заменой

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad E \rightarrow E - e\varphi, \quad (35.4)$$

(E — полная энергия частицы с зарядом e) или эквивалентно

$$\begin{aligned} \vec{p} &\rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}, \\ \frac{\partial}{\partial x_l} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} A_l \quad (l = 1, 2, 3, 4); \\ \vec{\nabla} &\rightarrow \vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}. \end{aligned} \quad (35.5)$$

При этом получаются следующие эквивалентные формы уравнения для электрона в электромагнитном поле:

$$imc\psi = \vec{\gamma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \psi, \quad (35.6)$$

или

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \cdot \vec{\gamma} \right) \psi = 0, \quad (35.7)$$

или, наконец,

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (35.8)$$

где гамильтониан $\hat{H}$ есть

$$\hat{H} = e\varphi - e\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}. \quad (35.9)$$

Уравнение (35.8) эквивалентно системе четырех уравнений, подобной (34.22):

$$\begin{aligned} (E - e\varphi - mc^2)\psi_1 &= \frac{c\hbar}{i} \left(\frac{\partial\psi_4}{\partial x} - i\frac{\partial\psi_4}{\partial y} + \frac{\partial\psi_3}{\partial z} \right) - \\ &\quad - e\{(A_x - iA_y)\psi_4 + A_z\psi_3\}, \\ (E - e\varphi - mc^2)\psi_2 &= \frac{c\hbar}{i} \left(\frac{\partial\psi_3}{\partial x} + i\frac{\partial\psi_3}{\partial y} - \frac{\partial\psi_4}{\partial z} \right) - \\ &\quad - e\{(A_x + iA_y)\psi_3 - A_z\psi_4\}, \\ (E - e\varphi + mc^2)\psi_3 &= \frac{c\hbar}{i} \left(\frac{\partial\psi_2}{\partial x} - i\frac{\partial\psi_2}{\partial y} + \frac{\partial\psi_1}{\partial z} \right) - \\ &\quad - e\{(A_x - iA_y)\psi_2 + A_z\psi_1\}, \\ (E - e\varphi + mc^2)\psi_4 &= \frac{c\hbar}{i} \left(\frac{\partial\psi_1}{\partial x} + i\frac{\partial\psi_1}{\partial y} - \frac{\partial\psi_2}{\partial z} \right) - \\ &\quad - e\{(A_x + iA_y)\psi_1 - A_z\psi_2\}. \end{aligned} \quad (35.10)$$

Введем две двухкомпонентные переменные

$$u = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (35.11)$$

и спиновые операторы Паули

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z).$$

Тогда уравнения (35.10) примут вид

$$\begin{aligned} \frac{i}{c\hbar}(E - mc^2 - e\varphi)u &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} - \frac{ie}{c\hbar} \mathbf{A} \right) v, \\ \frac{i}{c\hbar}(E + mc^2 - e\varphi)v &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} - \frac{ie}{c\hbar} \mathbf{A} \right) u, \end{aligned} \quad (35.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{c}(E - mc^2 - e\varphi)u &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) v, \\ \frac{1}{c}(E + mc^2 - e\varphi)v &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) u. \end{aligned} \quad (35.13)$$

Исключим из уравнений (35.13) переменную v , используя операцию квадрирования*:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2}(E + mc^2 - e\varphi)(E - mc^2 - e\varphi)u &= \frac{1}{c^2}\{(E - e\varphi)^2 - m^2c^4\}u = \\ &= \frac{1}{c}(E + mc^2 - e\varphi)\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) v = \\ &= \left\{ \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \frac{E + mc^2 - e\varphi}{c} - \frac{e}{c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot [E, \mathbf{A}] - \frac{e}{c} \boldsymbol{\sigma} \cdot [\varphi, \mathbf{p}] \right\} v = \\ &= \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 u + \left(\frac{e\hbar}{ic^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{e\hbar}{ic} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \varphi \right) v = \\ &= \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 u + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \left[\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] u - \frac{e\hbar}{ic} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E})v; \end{aligned}$$

здесь $\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\psi - (1/c)(\partial\mathbf{A}/\partial t)$ — вектор электрической напряженности. Если теперь принять во внимание, что

$$\begin{aligned} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] &= -\frac{e}{c} (\mathbf{p} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{p}), \\ \mathbf{p} \times \mathbf{A} &= \left(\frac{\hbar}{i} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} - \mathbf{A} \times \mathbf{p} \right), \end{aligned}$$

то получим окончательно:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{(E - e\varphi)^2}{c^2} - m^2c^2 - \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \right\} u &= \\ &= -\frac{e\hbar}{c} (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma})u - \frac{e\hbar}{ic} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E})v, \end{aligned} \quad (35.14)$$

где $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ — вектор магнитной индукции. Только левая часть этого уравнения приводит к уравнению Клейна–Гордона; правая дает искомые поправки к нему. Пренебрегая в дальнейшем членами порядка $1/c^3$, приведем выражение для энергии к виду

$$E = mc^2 + W, \quad (35.15)$$

где W — кинетическая энергия. Тогда из второго уравнения (35.13) в наинизшем приближении следует:

$$v \approx \frac{1}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} u. \quad (35.16)$$

Это выражение достаточно точно с точки зрения его подстановки в уравнение (35.14), так как дает в нем порядок $1/c^2$. Используя равенство

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \mathbf{E} \cdot \mathbf{p} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p},$$

приведем уравнение (35.14) к виду

$$Wu = \mathcal{H}u, \quad (35.17)$$

где $\widehat{\mathcal{H}}$ — приближенный гамильтониан

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}} = & \frac{1}{2m} \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi - \frac{1}{8m^3c^2} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^4 - \\ & - \frac{e\hbar}{4im^2c^2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{p}) - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} - \frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{B} \times \boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (35.18)$$

Первые два члена (35.18) представляют собой классический гамильтониан заряженной частицы, находящейся в электромагнитном поле. Следующий член — не зависящая от спина релятивистская поправка. Интересны, однако, лишь последние два слагаемых; одно из них равно

$$- \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (35.19)$$

и имеет смысл энергии взаимодействия спинового магнитного момента электрона

$$\left(\frac{e\hbar}{2mc} \right) \boldsymbol{\sigma} = \mu_0 \boldsymbol{\sigma}$$

с внешним магнитным полем $\mathbf{B}$; другое слагаемое

$$-\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} \quad (35.20)$$

представляет собой энергию взаимодействия спинового магнитного момента электрона $\mu_0\boldsymbol{\sigma}$ с эффективным магнитным полем:

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c}\mathbf{E} \times \mathbf{v} \approx \frac{1}{mc}\mathbf{E} \times \mathbf{p},$$

уже автоматически уменьшенную в два раза (поправка Томаса; см. лекцию 26).

Лекция 36

Электрон Дирака в центральном поле. Водородоподобный атом

Для описания центрально-симметричного электрического поля достаточно в формулах предыдущей лекции положить

$$\varphi = \varphi(r), \quad \mathbf{A} = 0, \quad (36.1)$$

где r — радиальная координата сферической системы координат. Гамильтониан для электрона с зарядом $-e$, находящегося в центрально-симметричном поле [ср. с (35.9)], имеет вид

$$\hat{H} = -e\varphi(r) + mc^2\beta + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}. \quad (36.2)$$

Уравнения (35.13) в этом случае переписываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c}(E - mc^2 + e\varphi)u &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}v, \\ \frac{1}{c}(E + mc^2 + e\varphi)v &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}u. \end{aligned} \quad (36.3)$$

Момент (34.35)

$$\hbar \mathbf{J} = \mathbf{x} \times \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}' \quad (36.4)$$

коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$ (36.2), так как имеет место симметрия относительно поворотов около центра.

Диагонализируя операторы $\hat{\mathbf{J}}^2$ и $\hat{J}_z$, необходимо принять

$$\mathbf{J}^2 = j(j+1), \quad J_z = m, \quad -j \leq m \leq +j. \quad (36.5)$$

Заметим, что матрица $\boldsymbol{\sigma}'$ подчиняется тем же перестановочным соотношениям, что и $\boldsymbol{\sigma}$, так что

$$\begin{aligned} \sigma_x'^2 &= \sigma_y'^2 = \sigma_z'^2 = 1, \\ \boldsymbol{\sigma}' \times \boldsymbol{\sigma}' &= 2i\boldsymbol{\sigma}'. \end{aligned} \quad (36.6)*$$

Тогда уравнения (36.4) и (36.5) дают допустимые значения чисел l и l_z .

$$l = j \pm \frac{1}{2}, \quad l_z = m \pm \frac{1}{2}. \quad (36.7)$$

Из уравнений (36.3) и псевдоскалярных свойств произведения $(\sigma \cdot p)$ следует, что спиноры u и v обладают противоположными четностями. Это обстоятельство приводит к следующим двум типам решений [ср. с (34.26) и (34.27)]:

Первый тип ($l = j - 1/2$). Волновая функция ψ имеет две матричные компоненты u и v

$$u = \frac{R(r)}{\sqrt{2j}} \begin{pmatrix} \sqrt{j+m} Y_{j-1/2, m-1/2} \\ \sqrt{j-m} Y_{j-1/2, m+1/2} \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{1-я компонента} \\ \text{по Дираку} \\ \equiv R(r) Z_{j, j-1/2, m} \\ \text{2-я компонента} \\ \text{по Дираку} \end{array} \quad (36.8)$$

$$v = \frac{iS(r)}{\sqrt{2(j+1)}} \begin{pmatrix} \sqrt{j+1-m} Y_{j+1/2, m-1/2} \\ -\sqrt{j+1+m} Y_{j+1/2, m+1/2} \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{3-я компонента} \\ \text{по Дираку} \\ \equiv iS(r) Z_{j, j+1/2, m} \\ \text{4-я компонента} \\ \text{по Дираку} \end{array}$$

Здесь двухкомпонентные функции $Z_{j, j \pm 1/2}$ играют роль сферических функций при решении задач с учетом спина. Заметим, что для них $l = j \pm 1/2$. При подстановке их в волновое уравнение (36.3) с учетом соотношений

$$(\sigma \cdot x) (f(r) Z_{j, j \pm 1/2, m}) = r f(r) Z_{j, j \mp 1/2, m}, \quad (36.9)$$

$$(\sigma \cdot x) (f(r) Z_{j, j \pm 1/2, m}) = \frac{\hbar}{i} \left(f'(r) + \left(1 \pm j \pm \frac{1}{2} \right) \frac{f(r)}{r} \right) Z_{j, j \mp 1/2, m} \quad (36.10)$$

получим систему уравнений для определения $R(r)$ и $S(r)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar c} (E - mc^2 + e\varphi) R(r) &= S'(r) + \left(j + \frac{3}{2} \right) \frac{S(r)}{r}, \\ \frac{1}{\hbar c} (E + mc^2 + e\varphi) S(r) &= -R'(r) + \left(j - \frac{1}{2} \right) \frac{R(r)}{r}. \end{aligned} \quad (36.11)$$

Полученные два уравнения первого порядка соответствуют одному нерелятивистскому радиальному уравнению второго порядка. Вспоминая, что в рассматриваемом случае $l = j - 1/2$, найдем в нерелятивистском пределе, что функция $R(r)$ принимает большие, а функция $S(r)$ — малые значения.

Второй тип ($l = j + 1/2$). В этом случае

$$\begin{aligned} u &= R(r) Z_{j, j+1/2, m}, \\ v &= -iS(r) Z_{j, j-1/2, m}, \end{aligned} \quad (36.12)$$

т.е. сферические спинорные функции меняются в равенствах (36.8) местами и изменяется знак получившейся при этом функции v . Вместо уравнений (36.11) получим теперь два новых «зацепляющихся» уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar c} (E - mc^2 + e\varphi) R(r) &= -S'(r) + \left(j - \frac{1}{2}\right) \frac{S(r)}{r}, \\ \frac{1}{\hbar c} (E + mc^2 + e\varphi) S(r) &= R'(r) + \left(j + \frac{3}{2}\right) \frac{R(r)}{r}. \end{aligned} \quad (36.13)$$

В случае кулоновского потенциала

$$e\varphi = \frac{Ze^2}{r}$$

уравнения (36.11) и (36.13) могут быть решены точно (см. у Шиффа, § 44).

ПРИМЕР (ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ). Основное состояние водородоподобного атома соответствует значениям квантовых чисел $j = 1/2$, $l = 0$ [используем первый тип решений (36.8) и (36.11)]. Уравнения (36.11) в этом случае принимают вид

$$\begin{aligned} \left(\varepsilon - \mu + \frac{z}{r}\right) R &= S' + \frac{2}{r} S, \\ \left(\varepsilon + \mu + \frac{z}{r}\right) S &= -R', \end{aligned} \quad (36.14)$$

где

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar c}, \quad \mu = \frac{mc}{\hbar}, \quad z = \frac{Ze^2}{\hbar c} = \frac{Z}{137}. \quad (36.15)$$

Зададим решение системы в виде

$$R(r) = r^\gamma e^{-\lambda r},$$

где γ и λ — подлежащие определению константы. Подставляя эту функцию в уравнения (36.14), заметим, что она удовлетворяет им при

$$\gamma = -1 + \sqrt{1 - z^2}, \quad \lambda = z\mu = Z \frac{em}{\hbar^2},$$

причем

$$\frac{S(r)}{R(r)} = \frac{1 - \sqrt{1 - z^2}}{z} = \text{const.}$$

Кроме того,

$$\varepsilon = \mu \sqrt{1 - z^2},$$

или

$$E = mc^2 \sqrt{1 - \left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2} = mc^2 - \frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} - \frac{Z^4 e^8 m}{8\hbar^4 c^2} + \dots,$$

где последовательные члены разложения энергии в ряд по степеням $(Ze^2/\hbar c)^2$ имеют соответственно смысл энергии покоя, энергии нерелятивистской задачи, первого релятивистского приближения и т. д.

Нормированное решение имеет теперь вид

$$R(r) = (2z\mu)^{\sqrt{1-z^2}} \sqrt{\frac{z\mu(1+\sqrt{1-z^2})}{(2\sqrt{1-z^2})!}} r^{-1+\sqrt{1-z^2}} e^{-z\mu r},$$

$$S(r) = \frac{1 - \sqrt{1 - z^2}}{z} R(r).$$

Предлагается найти два нормированных решения для основного состояния, соответствующих электрону со спином, ориентированным «вверх» или «вниз», путем подстановки этих функций в выражения для волновых функций (36.8), взятых при $j = 1/2$, $m = \pm 1/2$.

Лекция 37

Преобразование дираковских спиноров

Найдем закон преобразования волновой функции уравнения Дирака при переходе от одной системы координат к другой.

Запишем уравнение Дирака (35.7):

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{\gamma} \cdot \vec{A} \right) \psi = 0. \quad (37.1)$$

Предположим, что оно не зависит от выбора системы отсчета, т.е. потребуем, чтобы при переходе к новой системе

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu, \quad (37.2)$$

где $a_{\mu\nu}$ — коэффициенты ортогонального преобразования, выполнялись следующие соотношения*:

$$\psi \rightarrow \psi' = T^{-1} \psi \quad (37.3)$$

(T — квадратная 4×4 -матрица типа матриц Дирака**),

$$\begin{aligned} \nabla_\mu &\rightarrow \nabla'_\mu = a_{\mu\nu} \cdot \nabla_\nu, \\ A_\mu &\rightarrow A'_\mu = a_{\mu\nu} A_\nu. \end{aligned} \quad (37.4)$$

Напомним, что по повторяющимся греческим индексам автоматически производится суммирование от 1 до 4 (правило Эйнштейна). Нетрудно проверить, что при указанных преобразованиях уравнение Дирака (37.1) не меняет вида и в новых координатах записывается как

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla}' - \frac{ie}{\hbar c} \vec{\gamma} \cdot \vec{A}' \right) \psi' = 0,$$

если сделать определенные предположения о свойствах матрицы T . Для выяснения этих свойств умножим записанное выше уравнение слева на T и заменим ψ' на ψ по закону $\psi' = T^{-1} \psi$. Тогда

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + T \vec{\gamma} T^{-1} \vec{\nabla}' - \frac{ie}{\hbar c} T \vec{\gamma} \cdot \vec{A}' T^{-1} \right) \psi = 0.$$

или

$$\left(\frac{mc}{\hbar} + T\gamma_\lambda T^{-1} a_{\lambda\nu} \nabla_\nu - \frac{ie}{\hbar c} T\gamma_\lambda a_{\lambda\nu} A_\nu T^{-1} \right) \psi = 0.$$

Полученное уравнение должно совпадать с (37.1); сравнивая их, находим соотношение $T a_{\nu\lambda} \gamma_\nu T^{-1} = \gamma_\lambda$ или

$$T\gamma_\mu T^{-1} = a_{\mu\lambda} \gamma_\nu. \quad (37.5)$$

Здесь использовано свойство ортогональности преобразования (37.2) в форме $a_{\mu\nu} a_{\mu\lambda} = a_{\nu\mu} a_{\lambda\mu} = \delta_{\nu\lambda}$.

Рассмотрим бесконечно малые преобразования

$$a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \varepsilon_{\mu\nu} \quad (37.6)$$

($\varepsilon_{\mu\nu} \ll 1$) и будем пренебрегать высшими степенями $\varepsilon_{\mu\nu}$, что, однако, не нарушит общности выводов. Из ортогональности преобразования (37.2) следует, что

$$\varepsilon_{\mu\nu} = -\varepsilon_{\nu\mu}, \text{ так что } \varepsilon_{\nu\nu} = 0. \quad (37.7)$$

Для того чтобы координаты x, y, z, t всегда оставались вещественными, необходимо также сделать следующие предположения:

$$\left. \begin{array}{l} \varepsilon_{nm} \text{ — вещественные величины} \\ \varepsilon_{4m} = -\varepsilon_{m4} \text{ — чисто мнимые величины} \end{array} \right\} n, m = 1, 2, 3. \quad (37.8)$$

Предположим, что T отличается от единичной матрицы в первом порядке по ε

$$T = \mathbf{1} + S, \quad (37.9)$$

где матрица S имеет порядок ε ; тогда с той же точностью

$$T^{-1} = \mathbf{1} - S, \quad (37.10)$$

и формула (37.5) примет вид

$$S\gamma_\mu - \gamma_\mu S = \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\nu. \quad (37.11)$$

Это равенство автоматически удовлетворяется, если

$$S = -\frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu. \quad (37.12)$$

Следовательно, матрица трансформации спиноров T при преобразованиях координат (37.2) и (37.6) имеет вид

$$T = 1 - \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu. \quad (37.13)$$

Группа преобразований Лоренца, играющая фундаментальную роль в релятивистской теории, складывается из бесконечно малых преобразований координат (37.6) и из преобразований (37.13) спиноров ψ , так как отсюда можно получить путем интегрирования соответствующие *конечные* преобразования.

ПРИМЕР. *Бесконечно малый поворот вокруг оси z*

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 - \varepsilon x_2, & x'_3 &= x_3, \\ x'_2 &= x_2 + \varepsilon x_1, & x'_4 &= x_4 \end{aligned}$$

соответствует следующим значениям $\varepsilon_{\mu\nu}$:

$$\varepsilon_{12} = -\varepsilon, \quad \varepsilon_{21} = \varepsilon$$

(37.14a)

(все остальные компоненты $\varepsilon_{\mu\nu}$ равны нулю).

Тогда

$$T = 1 + \frac{\varepsilon}{2} \gamma_1 \gamma_2 = \left\| \begin{array}{cccc} 1 + \frac{i}{2}\varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{i}{2}\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \frac{i}{2}\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - \frac{i}{2}\varepsilon \end{array} \right\|. \quad (37.14б)$$

Поворот вокруг оси z на конечный угол ψ описывается матрицей T_φ : взять $(T_\varepsilon)^{\varphi/\varepsilon}$ и устремить ε к 0

$$T_\varphi = \left\| \begin{array}{cccc} e^{\frac{i\varphi}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} \end{array} \right\|. \quad (37.15)$$

При этом спинорная волновая функция ψ преобразуется как

$$\begin{aligned}\psi'_1 &= e^{\frac{i\varphi}{2}} \psi_1, & \psi'_2 &= e^{-\frac{i\varphi}{2}} \psi_2, \\ \psi'_3 &= e^{\frac{i\varphi}{2}} \psi_3, & \psi'_4 &= e^{-\frac{i\varphi}{2}} \psi_4.\end{aligned}\quad (37.16)$$

Заметим, что при повороте на угол $\varphi = 2\pi$, т.е. при полном повороте системы координат вокруг оси, спинорная волновая функция ψ *меняет знак*.

ПРИМЕР. *Бесконечно малое преобразование Лоренца*

$$\begin{aligned}x'_1 &= x_1 - \varepsilon tc = x_1 + i\varepsilon x_4, & x'_2 &= x_2, \\ x'_3 &= x_3, & x'_4 &= x_4 - i\varepsilon x_1\end{aligned}\quad (37.17)$$

соответствует матрице

$$T_\varepsilon = \mathbf{1} - \frac{i\varepsilon}{2} \gamma_1 \gamma_4 = \mathbf{1} + \frac{\varepsilon}{2} \alpha_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \varepsilon/2 \\ 0 & 1 & \varepsilon/2 & 0 \\ 0 & \varepsilon/2 & 1 & 0 \\ \varepsilon/2 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (37.18)$$

Для конечного преобразования Лоренца

$$x'_1 = \frac{x_1 - \beta x_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad x'_0 = \frac{x_0 - \beta x_1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad x_0 = ct \quad (37.19)$$

следует итерировать преобразование (37.17) n раз, причем $n = (1/\varepsilon) \text{Arth } \beta$ ($\varepsilon \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$); тогда

$$\begin{aligned}T_\beta &= (T_\varepsilon)^n = \left(1 + \frac{\varepsilon}{2} \alpha_1\right)^n \rightarrow e^{\frac{n\varepsilon}{2} \alpha_1} = \\ &= \text{ch } \frac{n\varepsilon}{2} + \alpha_1 \text{sh } \frac{n\varepsilon}{2} = \text{ch } \left(\frac{1}{2} \text{Arth } \beta\right) + \alpha_1 \text{sh } \left(\frac{1}{2} \text{Arth } \beta\right) = \\ &= \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - \beta^2}}{2\sqrt{1 - \beta^2}}} + \alpha_1 \sqrt{\frac{1 - \sqrt{1 - \beta^2}}{2\sqrt{1 - \beta^2}}}. \quad (37.20)\end{aligned}$$

Здесь был использован тот факт, что $\alpha_1^2 = 1$.

Инверсия (отражение) пространственных координат. Преобразование координат и спинорной волновой функции ψ в случае пространственной инверсии производится по правилу:

$$x'_n = -x_n, \quad x'_4 = x_4, \quad n = 1, 2, 3, \quad (37.21)$$

$$\psi \rightarrow \psi' = T_{ref}\psi. \quad (37.22)$$

Из условия (37.5) находим:

$$\begin{aligned} T_{ref} \gamma_n T_{ref}^{-1} &= -\gamma_n, \\ T_{ref} \gamma_4 T_{ref}^{-1} &= \gamma_4. \end{aligned} \quad (37.23)$$

Эти равенства удовлетворяются, если матрицу T выбрать в виде

$$T_{ref} = \gamma_4 = \beta. \quad (37.24)$$

Очевидно, что матрица T_{ref} обладает свойством

$$T_{ref} = T_{ref}^{-1} = T_{ref}^+. \quad (37.25)$$

При выборе $T_{ref} = \gamma_4$ компоненты спинорной волновой функции в новых координатах принимают вид

$$\psi'_1 = \psi_1, \quad \psi'_2 = \psi_2, \quad \psi'_3 = -\psi_3, \quad \psi'_4 = -\psi_4. \quad (37.26)$$

Отсюда видно, что пары компонент ψ_1, ψ_2 и ψ_3, ψ_4 обладают взаимно противоположной четностью относительно пространственной инверсии.

Следовательно,

в четном состоянии имеет место закон

$$\begin{aligned} \psi_1(\mathbf{x}) &= \psi_1(-\mathbf{x}), & \psi_2(\mathbf{x}) &= \psi_2(-\mathbf{x}), \\ \psi_3(\mathbf{x}) &= -\psi_3(-\mathbf{x}), & \psi_4(\mathbf{x}) &= -\psi_4(-\mathbf{x}), \end{aligned}$$

в нечетном состоянии — закон

$$\begin{aligned} \psi_1(\mathbf{x}) &= -\psi_1(-\mathbf{x}), & \psi_2(\mathbf{x}) &= -\psi_2(-\mathbf{x}), \\ \psi_3(\mathbf{x}) &= \psi_3(-\mathbf{x}), & \psi_4(\mathbf{x}) &= \psi_4(-\mathbf{x}), \end{aligned}$$

(37.27)

Сравнивая законы (37.27) с выражениями (36.8) и (36.12), находим, что четности состояний электрона равны четностям, определяемым

квантовым числом l . Для состояний позитрона доминирующими компонентами являются ψ_3, ψ_4 , четность которых противоположна четности компонент ψ_1, ψ_2 .

Некоторые свойства оператора пространственного отражения:

$$\begin{aligned} T_{ref} \gamma_\mu T_{ref}^+ &= \begin{cases} -\gamma_\mu, & \mu = 1, 2, 3, \\ +\gamma_\mu, & \mu = 4 \end{cases} \\ T_{ref} \beta \gamma_\mu T_{ref}^+ &= \begin{cases} -\beta \gamma_\mu, & \mu = 1, 2, 3, \\ +\beta \gamma_\mu, & \mu = 4. \end{cases} \end{aligned} \quad (37.28)$$

Построение с помощью спиноров и матриц Дирака величин, обладающих различными тензорными свойствами. Напомним, что в наших обозначениях латинские индексы пробегают значения 1, 2, 3, а греческие индексы — 1, 2, 3, 4; соответственно используется правило суммирования Эйнштейна. Тогда из формул (37.8) и (37.13) следует, что

$$T = 1 - \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu = 1 - \frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n - \frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n,$$

где член $-\frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n$ — действительный,

член $-\frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n$ — чисто мнимый.

γ -матрицы удовлетворяют равенствам:

$$\beta = \gamma_4, \quad \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}.$$

Заметим, что

$$T^{-1} = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\mu \gamma_\nu = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n + \frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n,$$

$$T^+ = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu}^* \gamma_\mu \gamma_\nu = 1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{mn} \gamma_m \gamma_n - \frac{1}{2} \varepsilon_{4n} \beta \gamma_n.$$

В общем случае $T^+ \neq T^{-1}$ (т. е. матрица T не унитарная). Лишь при $\varepsilon_{4n} = 0$ (чисто пространственный поворот) T становится унитарной.

(37.29)

(37.30)

Вообще же справедливы соотношения

$$\beta T^+ \beta = T^{-1}, \quad T^+ \beta = \beta T^{-1}, \quad \beta T^+ = T^{-1} \beta. \quad (37.31)$$

Приступим теперь к решению важной задачи о построении величин различных тензорных размерностей. Найдем прежде всего такую матрицу u , которая в квадратичной конструкции со спинором ψ дает скалярную величину.

Иначе говоря, при преобразованиях системы отсчета (37.2) $x_\mu \rightarrow x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu$ и соответствующем преобразовании спинорной волновой функции $\psi \rightarrow \psi' = T\psi$ выражение $\psi^+ u \psi$ должно обладать свойством

$$\psi^+ u \psi \rightarrow \psi'^+ u \psi' = \psi^+ u \psi. \quad (37.32)$$

На основании закона (37.3)

$$\psi'^+ u \psi' = (T\psi')^+ u T\psi = \psi^+ T^+ u T\psi,$$

и из требования (37.32) следует эквивалентное условие

$$\psi^+ u \psi = \psi^+ T^+ u T\psi.$$

Отсюда: матрица u должна удовлетворять требованию

$$u = T^+ u T \quad \text{при всех } T.$$

Пользуясь соотношениями (37.31), находим:

$$T^+ u T = \beta T^{-1} \beta u T = u,$$

а так как $\beta^2 = 1$, отсюда получим:

$$(\beta u) T = T(\beta u),$$

где матрица T должна иметь вид (37.29). Это условие удовлетворяется, если выбрать

$$\beta u = 1 \quad \text{или} \quad \beta u = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 = \gamma_5. \quad (37.33)$$

Полученные два решения показывают, что матрицу u можно выбрать двояко: $u = \beta \cdot 1$, либо $u = \beta \gamma_5$. Заметим, что при отыскании вида u

использовались инфинитезимальные преобразования (37.29) и, таким образом, не учитывалось отражение (существенно *конечное* преобразование); между тем именно при пространственной инверсии $T_{ref} = \beta$ конструкции $\beta \cdot 1$ и $\beta\gamma_5$ ведут себя прямо противоположным образом:

$$\begin{aligned} T_{ref}^+ \beta \cdot 1 T_{ref} &= \beta \beta 1 \beta = 1 \beta = \beta 1, \\ T_{ref}^+ \beta \gamma_5 T_{ref} &= \beta \beta \gamma_5 \beta = \gamma_5 \beta = -\beta \gamma_5. \end{aligned}$$

Поэтому

матрице $\beta 1$ соответствует *истинный скаляр* $\psi^+ \beta 1 \psi$,

матрице $\beta \gamma_5$ — *псевдоскаляр* $\psi^+ \beta \gamma_5 \psi$.

Введем обозначение $\bar{\psi} = \psi^+ \beta$; тогда

квадратичная форма $\bar{\psi} 1 \psi$ преобразуется как скаляр,

квадратичная форма $\bar{\psi} \gamma_5 \psi$ — как псевдоскаляр.

(37.34)

ЗАМЕЧАНИЕ. Лагранжиан спинорно- π -мезонного взаимодействия $\varphi \bar{\psi} \gamma_5 \psi$, используемый в теории поля, предполагает псевдоскалярные свойства мезонной волновой функции φ (псевдоскалярные мезоны).

Аналогичным путем нетрудно найти и другие дираковские матрицы-операторы, приводящие к квадратичным формам типа $\bar{\psi} u_{\mu} \dots \lambda \psi$, обладающим различными тензорными свойствами. Тогда величина $\bar{\psi} u_{\mu} \psi$ должна быть вектором (псевдовектором), а величина $\bar{\psi} u_{\mu\nu} \psi$ — антисимметричным тензором второго ранга. Например, для $\bar{\psi} u_{\mu} \psi$ сказанное означает, что

$$\bar{\psi}' u_{\mu} \psi' = a_{\mu\nu} \bar{\psi} u_{\nu} \psi,$$

где $x'_{\mu} = a_{\mu\nu} x_{\nu}$ [см. преобразование (37.2)].

Важно, что любую 4×4 -матрицу (оператор, действующий на спиновую переменную) можно представить как линейную комбинацию 16 базисных матриц, служащих для построения соответствующих тензорных величин; именно,

$1 \rightarrow$ скаляр;

$\gamma_5 \rightarrow$ псевдоскаляр;

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4 \rightarrow$ четырехмерный вектор;

$\gamma_2 \gamma_3 \gamma_4, \gamma_3 \gamma_1 \gamma_4, \gamma_1 \gamma_2 \gamma_4, \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \rightarrow$ четырехмерный псевдотензор (аксиальный 4-вектор);

$\gamma_2 \gamma_3, \gamma_3 \gamma_1, \gamma_1 \gamma_2, \gamma_1 \gamma_4, \gamma_2 \gamma_4, \gamma_3 \gamma_4 \rightarrow$ антисимметричный тензор.

(37.35)

Обращение времени. При обращении (инверсии) временной координаты имеют место преобразования

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &\rightarrow \mathbf{x}, & \nabla &\rightarrow \nabla, & \mathbf{A} &\rightarrow -\mathbf{A} \\ x_4 &\rightarrow -x_4, & \nabla_4 &\rightarrow -\nabla_4, & A_4 &\rightarrow A_4. \end{aligned} \quad (37.36)$$

Пусть спинорная волновая функция ψ является решением уравнения (37.1)

$$\frac{mc}{\hbar}\psi + \gamma \cdot \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \psi + \gamma_4 \left(\frac{\partial}{\partial x_4} - \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi = 0; \quad (37.37)$$

тогда для получения решения ψ' , соответствующего обращению времени, следует решить уравнение (37.37), в котором также производится обращение времени:

$$\frac{mc}{\hbar}\psi' + \gamma \cdot \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \psi' - \gamma_4 \left(\frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi' = 0. \quad (37.38)$$

Ясно, что эта задача не сводится к преобразованию типа $\psi' = T\psi$. Если, однако, положить

$$\psi' = S\psi^*, \quad (37.39)$$

то задача легко решается. Уравнение, комплексно сопряженное (37.37), дает:

$$\frac{mc}{\hbar}\psi^* + \gamma^* \cdot \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \psi^* - \gamma_4^* \left(\frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi^* = 0. \quad (37.40)$$

Умножив (37.40) слева на S , получим уравнение, которое можно отождествить с временным обращением уравнений (37.38), если потребовать выполнения условий

$$S\gamma^*S^{-1} = \gamma, \quad S\gamma_4^*S^{-1} = \gamma_4, \quad \psi' = S\psi^*. \quad (37.41)$$

Условия (37.41) будут соблюдены при выборе стандартной формы γ_μ -матриц [см. (34.9) и (34.10)], если взять матрицу S в виде

$$S = i\gamma_1\gamma_3 = \left\| \begin{array}{cccc} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{array} \right\| = \sigma'_y \quad (37.42)$$

[ср. (34.36)].

Зарядовое сопряжение. Среди решений уравнения (37.37) содержатся как электронные, так и позитронные. Поэтому естественно предположить, что из каждого решения ψ этого уравнения можно получить другое, удовлетворяющее уравнению (37.37) решение ψ^C , описывающее частицы с зарядом противоположного знака, т. е. осуществить преобразование

$$e \rightarrow -e, \quad (37.43)$$

причем уравнение (37.37) примет вид

$$\frac{mc}{\hbar} \psi^C + \gamma \cdot \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \psi^C + \gamma_4 \left(\nabla_4 + \frac{ie}{\hbar c} A_4 \right) \psi^C = 0. \quad (37.44)$$

Для описания рассмотренного перехода к частицам с противоположным знаком заряда попытаемся ввести новое преобразование

$$\psi^C = C \psi^* \quad (37.45)$$

(назовем его преобразованием *зарядового сопряжения*). Применяя оператор C слева к уравнению, комплексно сопряженному (37.40), найдем, что оно переходит в (37.44), если удовлетворяются условия

$$C \gamma^* C^{-1} = \gamma, \quad C \gamma_4^* C^{-1} = -\gamma_4. \quad (37.46)$$

Легко проверить, что для стандартной формы γ -матриц [см. (34.9) и (34.10)] оператор C совпадает с матрицей γ_2 :

$$C = \gamma_2.$$

Таким образом, зарядово сопряженное решение связано с исходным через равенство*

$$\psi^C = \gamma_2 \psi^*. \quad (37.47)$$

Комментарии

К стр. 10 ()*. Подставляя равенства $\delta ds = \frac{d\mathbf{x}}{ds} \delta d\mathbf{x}$ и $\delta U = \frac{\partial U}{\partial \mathbf{x}} \delta \mathbf{x}$ в вариацию действия, получим:

$$\int \sqrt{E - U} \frac{d\mathbf{x}}{ds} \delta d\mathbf{x} - \int \frac{\partial U / \partial \mathbf{x}}{2\sqrt{E - U}} \delta \mathbf{x} ds = 0.$$

Интегрируя первое слагаемое по частям, будем иметь:

$$\int_1^2 \sqrt{E - U} \frac{d\mathbf{x}}{ds} \delta d\mathbf{x} = \sqrt{E - U} \frac{d\mathbf{x}}{ds} \delta \mathbf{x} \Big|_1^2 - \int_1^2 \frac{d}{ds} \left\{ \sqrt{E - U} \frac{d\mathbf{x}}{ds} \right\} \delta \mathbf{x} ds.$$

Первый член справа обращается в нуль вместе с вариациями δx^i на концах отрезка интегрирования. Теперь выражение для вариации действия приобретает вид

$$\int \left\{ \frac{d}{ds} \left[\sqrt{E - U} \frac{d\mathbf{x}}{ds} \right] + \frac{\partial U / \partial \mathbf{x}}{2\sqrt{E - U}} \right\} \delta \mathbf{x} ds = 0.$$

В силу произвольности вариаций $\delta \mathbf{x}$ мы заключаем, что подынтегральное выражение должно быть равно нулю, откуда и имеем уравнение экстремали.

К стр. 15 ()*. В классической физике комплексные величины играют роль лишь *способа* одновременной записи двух независимых решений (что особенно полезно при исследовании линейных дифференциальных уравнений второго порядка с вещественными коэффициентами), причем мнимая единица i не позволяет тогда этим решениям смешиваться друг с другом. Напротив, в квантовой механике роль комплексности волновой функции ψ выходит за рамки простого технического приема, так как мнимая единица фигурирует в *коэффициентах* уравнений [например, (2.4)]; тем самым вещественная и мнимая части оказываются нетривиальным образом «взаимосвязанными».

*К стр. 15 (**).* Стационарным состояниям соответствуют определенные значения энергии системы. Прочие состояния можно представить как суперпозицию (смесь) различных стационарных состояний. В последнем случае волновая функция будет линейной комбинацией волновых функций стационарных состояний.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний называют также уравнением, не зависящим от времени, и хотя фактически время должно входить в его решение в форме (2.2), соответствующая экспонента часто не пишется.

*К стр. 15 (***)*. Уравнение (2.7) — типичное уравнение непрерывности, аналогичное дифференциальному закону сохранения заряда в электродинамике. В согласии с интерпретацией, предложенной М. Борном, величину (2.8) следует понимать как отнесенную к единице объема вероятность найти частицу в окрестности данной точки. Тогда из уравнения (2.7) естественно следует интерпретация вектора (2.9) как плотности потока вероятности. Заметим, что в стационарном состоянии плотность вероятности не зависит от времени (распределение вероятности стационарно).

К стр. 16 ()*. Оператор Лапласа (лапласиан)

$$\nabla^2 \equiv \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

в сферических координатах имеет вид

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}.$$

Так как точка все время остается на сфере, то достаточно взять угловую часть лапласиана Δ , которую мы обозначим через Λ

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

При этом $\Delta = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \Lambda \right]$. В этих обозначениях следует записать (2.13).

К стр. 21 ()*. Заметим, что ситуация (в смысле вероятности нахождения частицы в разных точках прямоугольной ямы) резко отличается от аналогичной ситуации в классической механике (мяч, упруго

скачущий между двумя стенками). Полезно для иллюстрации полученных выводов изобразить волновую функцию графически при различных n .

К стр. 37 ()*. Обсуждая атом водорода, Ферми в выражении для потенциальной энергии (8.1) и в последующих формулах употребляет величину Z , так что все полученные им выводы годятся для Z — 1-кратно ионизованного атома любого элемента (Ze — заряд ядра, где Z — порядковый номер элемента в периодической системе Менделеева). В частном случае $Z = 1$ эти выводы относятся к атому водорода.

К стр. 48 ()*. Говоря о *полноте* системы (набора) собственных функций, имеют в виду тот факт, что не существует функции, ортогональной (в смысле Гильберта) всем функциям системы и при этом не равной тождественно нулю.

Коэффициенты разложения c_k в (9.17) имеют следующий физический смысл: квадрат модуля $|c_k|^2$ представляет собой относительную вероятность нахождения исследуемой системы в состоянии с энергией E_k .

К стр. 59 ()*. Существенно, что δ -функция Дирака (как и ряд других так называемых несобственных функций) не является функцией в обычном смысле, так как не может быть задана никаким обычным методом задания функций (аналитическим, графическим или табличным). Ее определение существенно опирается на операцию интегрирования, т. е. все ее свойства имеют чисто интегральный смысл. Записанные без связи с операциями интегрирования, как это часто делается, они приобретают символический характер.

В квантовой механике δ -функцию часто используют при нормировке собственных функций непрерывного спектра.

Подробно об аппарате δ -функции можно прочесть в книге Д. Д. Иваненко и А. А. Соколова «Классическая теория поля», (М., 1960).

К стр. 70 ()*. **Доказательство формулы (13.6) (по курсу Э. Персико, стр. 110–119).**

Возьмем волновую функцию $f(x, t)$ в виде

$$\int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk.$$

Тогда центр спектральной линии (в смысле частот) или «центр тяжести» интенсивности можно определить как

$$\bar{k} = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} k |A|^2 dk, \quad (1)$$

где полная интенсивность спектра обозначена через

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 dk. \quad (2)$$

Полуширину Δk спектральной линии следует определять по формуле, аналогичной формуле средней квадратичной погрешности в теории ошибок:

$$(\Delta k)^2 = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k})^2 |A|^2 dk. \quad (3)$$

Совершенно аналогичным образом определим «центр одномерного волнового пакета» $\bar{x}$:

$$\bar{x} = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} x |f|^2 dx, \quad (4)$$

где интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |f|^2 dx, \quad (2')$$

очевидно, совпадает с (2) по определению волновой функции $f(x, t)$. В качестве полуширины пакета Δx возьмем величину, определяемую соотношением

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^2 |f|^2 dx. \quad (5)$$

По предположению о существовании пакета волн функция f заметно отличается от нуля только внутри некоторой одномерной области и практически равна нулю за ее пределами.

После этих предварительных замечаний покажем, что «более компактному» одномерному волновому пакету должна соответствовать большая ширина спектральной линии, точнее: полуширина пакета Δx и полуширина линии Δk связаны неравенством

$$\Delta k \cdot \Delta x \geq \frac{1}{4\pi}, \quad (6)$$

играющим весьма важную роль в волновой механике; оно следует из теоремы Фурье и выполняется независимо от конкретного физического смысла входящих в него величин.

Чтобы доказать это утверждение, введем функцию

$$D = \left| \frac{x - \bar{x}}{2(\Delta x)^2} F + \frac{\partial F}{\partial x} \right|^2. \quad (7)$$

Раскрывая это выражение, получаем:

$$\begin{aligned} D &= \frac{(x - \bar{x})^2}{4(\Delta x)^4} F F^* + \frac{x - \bar{x}}{2(\Delta x)^2} \left(F \frac{\partial F^*}{\partial x} + F^* \frac{\partial F}{\partial x} \right) + \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial F^*}{\partial x} = \\ &= \frac{(x - \bar{x})^2}{4(\Delta x)^4} F F^* + \frac{1}{2(\Delta x)^2} \frac{\partial}{\partial x} [(x - \bar{x}) F F^*] - \\ &\quad - \frac{F F^*}{2(\Delta x)^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(F^* \frac{\partial F}{\partial x} \right) - F^* \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \geq 0. \end{aligned}$$

Умножим последнее равенство на dx и проинтегрируем в бесконечных пределах. Заметим при этом, что $F F^* = f f^* = |f|^2$. Используя обозначения (5) и (2), можно записать

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} D dx &= \frac{I}{4(\Delta x)^2} + \frac{1}{2(\Delta x)^2} [(x - \bar{x}) F F^*] \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \\ &\quad - \frac{I}{2(\Delta x)^2} + \left[F^* \frac{\partial F}{\partial x} \right] \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} F^* \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} dx \geq 0. \end{aligned}$$

Если F достаточно быстро стремится к нулю при $x \rightarrow \pm\infty$, то второй и четвертый члены обращаются в нуль, так что

$$-\frac{I}{4(\Delta x)^2} - \int_{-\infty}^{+\infty} F^* \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} dx \geq 0. \quad (8)$$

Здесь второе слагаемое можно связать с Δk , именно: используя (3) и (7), а также равенство

$$A(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, 0) e^{-ikx} dx,$$

получаем

$$\begin{aligned} (\Delta k)^2 &= \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k}) A A^* dk = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k})^2 A dk \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, 0) e^{-2\pi i k x} dx = \\ &= \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k})^2 A dk \int_{-\infty}^{+\infty} F^*(x) e^{2\pi i (k - \bar{k}) x} dx. \end{aligned}$$

Меняя порядок интегрирования, просто найдем

$$(\Delta k)^2 = \frac{1}{I} \int_{-\infty}^{+\infty} F^*(x) dx \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k}) A e^{2\pi i (k - \bar{k}) x} dk. \quad (9)$$

Чтобы освободиться здесь от интегрирования по k , прежде всего заметим, что с помощью очевидного равенства

$$f(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ikx} dk$$

выражение (7) можно переписать в виде

$$F(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{2\pi i (k - \bar{k}) x} dk;$$

дважды продифференцировав это равенство, получим

$$\frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} = -4\pi^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k})^2 A e^{2\pi i(k - \bar{k})x} dk.$$

Подстановка полученного выражения в (9) дает:

$$(\Delta k)^2 = -\frac{1}{4\pi^2 I} \int_{-\infty}^{+\infty} F^* \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} dx.$$

Таким образом, здесь получается интеграл, уже знакомый нам по соотношению (8), которое теперь можно переписать в виде

$$-\frac{I}{4(\Delta x)^2} + 4\pi^2 I(\Delta k)^2 \geq 0.$$

Отсюда на основании неравенства $I > 0$ следует соотношение (6). Произведение $\Delta k \cdot \Delta x$ принимает минимальное значение $(4\pi)^{-1}$ при $D = 0$, иначе говоря, при выполнении условия

$$\frac{x - \bar{x}}{2(\Delta x)^2} F + \frac{\partial F}{\partial x} = 0.$$

Интегрируя последнее равенство, получаем:

$$F = c e^{-\frac{(x - \bar{x})^2}{4(\Delta x)^2}}$$

или

$$f(x, 0) = c \exp \left\{ -\frac{(x - \bar{x})^2}{4(\Delta x)^2} + 2\pi i k x \right\} \quad (10)$$

(синусоида, модулированная кривой типа Гаусса с максимумом при $x = \bar{x}$).

Интересно (и вполне закономерно), что фурье-амплитуда $A(k)$ имеет при этом форму, аналогичную $F(x)$, причем вместо x и $\bar{x}$ в ней фигурируют, конечно, k и $\bar{k}$.

Доказательство равенства (6) можно без труда распространить на случай трехмерной области. Учитывая, что $\mathbf{k} = (1/\hbar)\mathbf{p}$, получаем соотношение (13.6), что и требовалось доказать.

К стр. 77 ()*. При определении детерминантов удобно использовать символ Леви–Чивита $\varepsilon_{ij\dots l}$ — полностью антисимметричный аксиальный тензор ранга (валентности), совпадающего с размерностью n рассматриваемого пространства, т.е. в данном случае с порядком матрицы, причем $\varepsilon_{12\dots n}$. Тогда

$$\varepsilon_{ij\dots l} \det A = \sum_{p,q,\dots,s} a_{pi} a_{qj} \dots a_{sl} \varepsilon_{pq\dots s}$$

или

$$\det A = \frac{1}{n!} \sum_{\substack{p,q,\dots,s \\ i,j,\dots,l}} \varepsilon_{ij\dots l} \varepsilon_{pq\dots s} a_{pi} a_{qj} \dots a_{sl}.$$

Отсюда нетрудно получить *алгебраическое* дополнение к элементу a_{ip} матрицы A (т.е. $\text{Adj } a_{ip}$), взяв просто

$$\text{Adj } a_{ip} = \frac{\partial}{\partial a_{ip}} \det A = \frac{1}{(n-1)!} \sum_{\substack{q,\dots,s \\ j,\dots,l}} \varepsilon_{ij\dots l} \varepsilon_{pq\dots s} a_{qj} \dots a_{sl}.$$

Эти формулы позволяют автоматически получать ряд важных соотношений, используемых в «Конспектах».

*К стр. 77 (**)*. Элементы единичной матрицы можно записать в виде

$$\mathbf{1} = \|e_{ij}\|, \\ e_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Введенный таким образом *тензор второго ранга* δ_{ij} носит название *дельта-символа Кронекера*. Его можно назвать «оператором замены индекса при суммировании» (в самом деле, $a_i \delta_{ik} \equiv a_k$) точно так же, как δ -функцию Дирака — «оператором замены аргумента при интегрировании» [см. формулы (11.21)]. Более того, переходя от матрицы (14.29) к бесконечномерной матрице ($n \rightarrow \infty$) и тем самым к гильбертову пространству функций, мы непосредственно получим δ -функцию в матричной записи, причем сама единичная матрица переходит при этом в

матрицу δ -функции, умноженную на элемент объема соответствующего пространства.

К стр. 112 ()*. Векторное произведение двух векторов (операторов) $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ удобно представить в форме $[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_i = \varepsilon_{ijk} a_j b_k$ и учесть соотношение $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}$ (ε_{ijk} — трехмерный символ Леви — Чивита; по повторяющимся индексам подразумевается суммирование от 1 до 3).

К стр. 115 ()*. Полезно заметить, что в релятивистской механике энергия представляет собой четвертую компоненту четырехмерного вектора импульса; ее сохранение следует из свойств однородности (симметрии по отношению к трансляциям) времени. Важно, что и *структура сохраняющихся величин* может быть получена при рассмотрении соответствующих свойств симметрии.

К стр. 117 ()*. Группой $\mathbf{G}$ называется совокупность элементов произвольной природы, для которых определена групповая операция («умножение») и которые удовлетворяют следующим условиям:

1) Результат «умножения» двух элементов группы является также элементом этой группы: если $A \in \mathbf{G}$, $B \in \mathbf{G}$, то $AB \in \mathbf{G}$.

2) Среди элементов группы должен быть единичный элемент ($IA = AI = A$, $I \in \mathbf{G}$).

3) Каждому элементу группы соответствует обратный ему элемент, содержащийся в этой же группе ($A^{-1}A = AA^{-1} = I$, $A \in \mathbf{G}$, $A^{-1} \in \mathbf{G}$).

4) Групповая операция подчиняется ассоциативному закону:

$$A(BC) = (AB)C.$$

Заметим, что, вообще говоря, групповая операция некоммукативна, т.е.

$$AB \neq BA.$$

Важным примером группы является совокупность всех неособенных квадратных $n \times n$ -матриц; из них группу же образуют все унитарные матрицы (подгруппа предыдущей). Если между всеми элементами некоторой данной группы и соответствующими элементами группы унитарных $n \times n$ -матриц можно установить однозначное соответствие, то исследование исходной группы сводится к исследованию группы унитарных матриц, и последняя называется представлением первой.

Теория групп широко используется в теоретической физике, особенно в квантовой механике и в теории элементарных частиц. Прежде всего, как мы сейчас видели, симметрия относительно групп преобразований связана с законом сохранения физических величин. Эти законы сохранения в их групповой интерпретации полезны при классификации элементарных частиц и их взаимодействий. Естественно, что и в квантовой механике состояния систем удобно классифицировать на групповой основе (см. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, «Квантовая механика», М., 1963, § 96). Если симметрия, свойственная невозмущенному гамильтониану (в теории возмущений, см. лекции 21–23), нарушается при наложении возмущения, то снятие исходного вырождения уровней можно определить, исходя из поведения возмущающего гамильтониана относительно рассматриваемых групп преобразований.

Наконец, эта же связь законов сохранения с группами преобразований определяет вероятности допустимых квантовых переходов между различными состояниями физических систем, т. е. позволяет просто получать правила отбора и оценивать матричные элементы, соответствующие этим переходам.

Из теории представлений групп следуют, с другой стороны, трансформационные свойства волновых функций, описывающих частицы и системы частиц, и простейшие формы дифференциальных уравнений, которым должны удовлетворять эти функции. Так можно, например, прийти (исходя из группы Лоренца) к уравнению Дирака (другой подход к которому см. в лекции 34) и к (би-) спинорам. Этот аспект проблемы, конечно, тесно связан и с законами сохранения; он в равной мере существен в теории квантованных полей и элементарных частиц.

Для изучения этих вопросов читателю следует рекомендовать следующие книги: Б. Л. Ван-дер-Варден «Метод теории групп в квантовой механике» (Ижевск, 1999), Г. Я. Любарский, «Теория групп и ее применение в физике», М., 1957; В. Хейне, «Теория групп в квантовой механике», ИЛ, 1963, и Е. Вигнер, «Теория групп и ее приложения к квантовомеханической теории атомных спектров», ИЛ, 1961, где можно найти более полное перечисление соответствующей литературы.

К стр. 124 ().* В задаче многих тел ($n \geq 2$, где n — число тел) количество неизвестных равно $3n$ (число степеней свободы); однако нетрудно упростить эту задачу, снизив число неизвестных на 3. Именно, переходя к системе центра масс, заметим, что координаты центра масс системы являются *циклическими переменными* (см. стандартные курсы

классической механики), и их можно отбросить, не нарушая общности рассмотрения. Отсюда следует универсальность использования относительных координат частиц, составляющих рассматриваемую изолированную физическую систему, и практическая предпочтительность системы центра масс.

К стр. 124 ()*. Здесь $U(r)$ — энергия взаимодействия заряженной частицы с кулоновским центром. Таким образом, выражение (21.25) представляет собой гамильтониан одной бесспиновой частицы, движущейся в магнитном и центральном кулоновском полях.

Раскрывая квадрат $\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2$, необходимо иметь в виду, что оператор $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$, вообще говоря, не коммутирует с вектором $\mathbf{A}$. Однако $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}(\nabla \cdot \mathbf{A})$; при этом стоящую справа величину $\text{div } \mathbf{A}$ в статическом случае можно обратить в нуль с помощью градиентного преобразования, что здесь и используется.

К стр. 136 ()*. Несколько замечаний по поводу «правил отбора», характеризующих возможные переходы между различными энергетическими уровнями; вспоминая, что эволюция системы (т.е. изменение ψ -функции во времени) описывается S -матрицей (см. лекцию 19), можно без труда заключить, что переход между состояниями ψ_a и ψ_b возможен, если только $(\psi_b | S\psi_a) \neq 0$. В противном случае переход запрещен. Правила, по которым должны изменяться квантовые числа при разрешенных переходах и называются *правилами отбора*. Поскольку эволюция системы рассматривается в рамках теории возмущений, в первом порядке достаточно ограничиться членом разложения S -матрицы, пропорциональным первой степени гамильтониана $\mathcal{H}$. Разрешенными будут, таким образом, те переходы, для которых матричные элементы гамильтониана отличны от нуля. На основании гамильтониана (24.1) и свойств ортогональности волновых функций легко найти соответствующие правила отбора:

$$\Delta m = \pm 1 \text{ или } 0 \quad \left(m \begin{matrix} \nearrow m \pm 1 \\ \searrow m \end{matrix} \right).$$

К стр. 139 ()*. Выражение (23.11) для вероятности $n \rightarrow s$ перехода системы, очевидно, характеризует распределение конечных энер-

гетических состояний в зависимости от времени t . С другой стороны, согласно соотношению неопределенностей (13.7), $\delta t \delta E \approx \hbar$. Между этими обстоятельствами существует следующая взаимосвязь (которую и предлагает на обсуждение читателю Э. Ферми): границы центрального (соответствующего наименьшим изменениям энергии) максимума функции (23.11) определяются равенством $(t/2\hbar)(E_0^{(1)} - E_0^{(n)}) = \pm\pi$ или $t \cdot 1/2 (E_0^{(s)} - E_0^{(n)}) = \pm\hbar$; подобным же образом определяются и границы побочных максимумов вероятности перехода. С ростом времени t эти области постепенно суживаются, концентрируясь около исходной энергии $E_0^{(n)}$, что соответствует смыслу соотношения неопределенностей (13.7).

К стр. 139 ().* Так как $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(\mathbf{r})$, то на основании формулы (11.22) для фурье-образа функции $1/r$ имеем $1/(2\pi^2 k^2)$. При подстановке в интеграл (23.20) получим при этом

$$\begin{aligned} \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}}}{r} d^3x &= \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d^3k}{k^2} \int \exp \left\{ i \left(\frac{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}{\hbar} + \mathbf{k} \right) \mathbf{r} \right\} d^3x = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{2\pi^2} \int \frac{\delta \left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}{\hbar} \right)}{k^2} d^3k = \frac{4\pi\hbar^2}{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|^2}. \end{aligned}$$

К стр. 151 ().* В однородном магнитном поле вектор спинового магнитного момента должен, естественно, прецессировать, но в случае неоднородного поля кроме пары сил имеется еще сила, приводящая к поступательному движению. Именно это обстоятельство привело к известным результатам опыта Штерна и Герлаха, правильно интерпретированным Уленбеком и Гаудсмитом (см. курс Д. И. Блохинцева «Основы квантовой механики», М., 1961, стр. 24, 196 и далее).

К стр. 158 ().* **Векторная модель.** Можно сформулировать простые и удобные правила для определения основных характеристик (квантовых чисел) сложных систем, содержащих несколько электронов. Прежде всего проекции результирующих векторов моментов должны быть кратными $\hbar$, причем кроме целых коэффициентов (квантовых чисел), как при сложении орбитальных моментов, в случае участия спиновых моментов электронов возможны также полуцелые числа. Это соответствует дискретным допустимым поворотам векторов моментов

в пространстве. Например, при сложении моментов двух электронов с $l = 2$ и $l = 3$ соответственно получается следующая совокупность возможных результирующих значений $l : 1, 2, 3, 4$, и 5 . Для каждого из этих состояний по отдельности значения магнитного квантового числа определяются обычным образом. Этот способ нахождения результирующих квантовых чисел можно связать с теорией групп; он значительно проще, чем использование в вычислениях модулей соответствующих векторов [например, $\sqrt{l(l+1)}$ и $\sqrt{s(s+1)}$] с последующим требованием, чтобы взаимная ориентация этих векторов соответствовала целым значениям результирующего l и целым, либо полуцелым, значениям результирующего s . Вместе с тем оба подхода полностью эквивалентны.

Применяя метод векторной модели, удобно пользоваться наглядными диаграммами [не отражающими, однако, непосредственно *реальной* ориентации соответствующих векторов в пространстве и даже не учитывающими правильного определения модуля этих векторов (типа $\sqrt{l(l+1)}$)]. На таких вспомогательных диаграммах в качестве длины новых (вспомогательных) векторов принимаются значения проекции соответствующих, *реальных физических* векторов на выделенную ось. (См., например, книгу Г.Семата «Введение в атомную физику», ИЛ, 1948, гл. 6. § 84).

К стр. 160 ()*. Здесь Ферми, по-видимому, привлекла наглядность интерпретации «в s -состоянии $l = 0$ и, следовательно, sl -взаимодействие равно нулю». Помня результат строгого расчета $\delta_1 E(2s) + \delta_2 E(2s) = -(5/128)(e^8 m / \hbar^4 c^2)$, он записал $\delta_2 E(2s) = -(5/128) \dots$. Более точный расчет дает $\delta_1 E(2s) = -(1/16) e^8 m / \hbar^4 c^2$, $\delta_2 E(2s) = -(13/128) e^8 m / \hbar^4 c^2$ и в результате $\delta_1 E(2s) + \delta_2 E(2s) = -(5/128)(e^8 m / \hbar^4 c^2)$ [см., например, формулу (42.21) у Шиффа для $n = 2$, $l = 0$].

При $l = 0$, вообще говоря, получается *не нулевое* значение $\delta_1 E$, если учесть *контактное взаимодействие* [см. книгу А.А.Соколова, Ю.М.Лоскутова и И.М.Тернова «Квантовая механика» (М., 1962), стр. 338–339, формулы (20.10) и (20.15)]. Однако этот подход все же можно применять при $l = 0$, если одновременно $J = L + 1/2$, так как расходимость типа $1/l$ компенсируется тогда линейной зависимостью числителя от l [см. формулы (39.4) и (39.5) у Шиффа].

К стр. 162 ()*. Приведенные в этой лекции выводы не являются последовательными с точки зрения полного синтеза релятивистской теории и теории, учитывающей спин электрона. Даже в такой теории учет

спин-орбитального взаимодействия приводит к более полным результатам, если использовать некоторые простые следствия теории представлений групп (см. лекцию 29), после рассмотрения которых тем не менее полезно оглянуться на выводы этой лекции.

С более детальной теорией эффекта Зеемана можно ознакомиться, например, по учебнику Д. И. Блохинцева.

К стр. 169 ()*. В микромире частицы одного «сорта» *тождественны* не только в том смысле, что их свойства (масса покоя, заряд и пр.) в точности совпадают между собой, но и ввиду принципиальной невозможности проследить эволюцию индивидуальной частицы в системе (вследствие соотношений неопределенности не существует траектории частиц!).

К стр. 184 ()*. Полученный вывод очень просто вытекает из теоремы Вигнера (28.15). В самом деле, так как кеты $|n, j, m\rangle$, взятые в качестве базисных векторов, при различных j или m приводят к разным неприводимым представлениям группы поворотов (или, как говорят чаще, но менее точно, вращений), то матричные элементы оператора A , коммутирующего со всеми операторами этой группы, должны быть равны нулю при $m' \neq m$ и $j' \neq j$.

Следующие теоремы и их следствия вытекают из теоремы (28.22).

К стр. 179 ()*. Квантовая статистика представляет собой обширный раздел науки. Здесь мы приведем лишь несколько основных понятий и результатов этой теории. Хорошее систематическое изложение квантовой статистики можно найти в монографии А. Я. Хинчина «Математические основания квантовой статистики», М., 1951; вопросы, затронутые в этой части лекций Э. Ферми, у Хинчина излагаются в гл. III, (§§ 3 и 5).

Соответственно свойствам симметрии волновых функций систем частиц следует говорить о *статистике Бозе – Эйнштейна* (симметричная статистика) и о *статистике Ферми – Дирака* (антисимметричная статистика). Принцип Паули и дальнейшее обсуждение, приведенное Э. Ферми, достаточно хорошо характеризуют основные утверждения указанных альтернативных статистик. Таким образом, в статистике Бозе – Эйнштейна одинаковые частицы симметричны в отношении занимаемых ими положений (в широком смысле, включая как просто координаты, так и всевозможные внутренние характеристики в совокупности) и не «мешают» друг другу занимать одинаковые физические со-

стояния. Напротив, в статистике Ферми–Дирака одинаковые частицы в указанном смысле антисимметричны, и действует принцип исключения Паули. Здесь существенно подчеркнуть *принципиальную неразличимость* рассматриваемых одинаковых частиц. Если же из понятия «неразличимости» исключить хотя бы соображения принципа неопределенности Гейзенберга, то мы пришли бы (в симметричном варианте) к известной из классической теории статистике Больцмана («полная статистика», по терминологии Хинчина). Однако с другой точки зрения можно говорить, что в некотором смысле статистика Больцмана лежит *между* двумя альтернативными квантовыми статистиками, и по сравнению с ней статистика Бозе–Эйнштейна более благоприятствует накоплению одинаковых частиц в одном и том же физическом состоянии, а статистика Ферми–Дирака соответствует своего рода «расталкиванию».

Для различных статистик характерны различные определения статистических весов состояний физических систем. Именно: каждому *конкретному* набору чисел заполнения $N_1, N_2, \dots, N_s$ (при данном числе частиц в системе и данной полной энергии) соответствует, вообще говоря, несколько конфигураций. Иначе говоря, каждое состояние должно браться с некоторым *статистическим весом*, который нетрудно вычислить для каждой конкретной статистики.

В статистике Больцмана (неразличимости нет!) статистический вес состояния, задаваемого конкретными значениями $N : N_1, N_2, \dots, N_s, \dots$, равен

$$\Omega_B = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_s!} \quad (30.23a)$$

и определяется как число различных способов, с помощью которых можно расставить группу из одинаковых (но различимых) N -элементов, распадающуюся на подгруппы из $N_1, N_2, \dots, N_s, \dots$ элементов.

В статистике Бозе–Эйнштейна все частицы неразличимы (рассматриваются частицы одного и того же сорта, например фотоны или π -мезоны), а волновые функции симметричны по всем частицам. Тогда при попытке переставить частицы (как в статистике Больцмана) мы в противоположность статистике Больцмана вовсе не получим нового состояния системы. Следовательно, в статистике Бозе–Эйнштейна статистический вес любого реализуемого состояния всегда равен *единице*:

$$\Omega_{B-E} = 1. \quad (30.23b)$$

В статистике Ферми–Дирака статистический вес может принимать два значения: 0 и 1. Первое (нуль) — в том случае, когда хотя бы одно число заполнения больше 1; второе (единица) — во всех остальных случаях (когда все числа заполнения равны либо 0, либо 1:

$$\Omega_{F-D} = \begin{cases} 0, \\ 1. \end{cases} \quad (30.23в)$$

Для знакомства с основами квантовой статистики можно также рекомендовать книгу Э. Ферми, «Молекулы и кристаллы», ИЛ, 1947, ч. III.

К стр. 189 ()*. Следует заметить, что пара- и ортосостояния атома гелия в некотором смысле изолированы друг от друга, так как существует запрет перехода от одних к другим (соответствующие матричные элементы в низшем порядке теории обращаются в нуль). Этот запрет, конечно, не абсолютен, и существует возможность интеркомбинаций состояний, характеризуемая, однако, весьма большим временем, так что соответствующие линии в спектре гелия очень слабы (Зоммерфельд, «Строение атома и спектры», т. II, стр. 529).

К стр. 194 ()*. Переходы между пара- и ортосостояниями молекул водорода [как и между пара- и ортогелием (см. лекцию 31)] запрещены, так что эти состояния не «смешиваются». Так как полный ядерный спин параводородного атома равен нулю, ему соответствует лишь *одна* (нулевая) проекция на выделенную ось; в случае ортоводорода возможны *три* проекции (+1, 0 и −1), так как полный ядерный спин в этом случае равен единице. Таким образом, с точки зрения равновероятности статистического распределения по состояниям можно заключить, что в условиях термодинамического равновесия молекулы пара- и ортоводорода представлены в пропорции 1 : 3. Это обстоятельство приводит к важным следствиям, отлично подтверждаемым экспериментом. Именно таково, например, соотношение *интенсивностей* соответствующих линий вращательных спектров молекулярного водорода. Только таким распределением удастся объяснить также поведение вращательной теплоемкости газообразного водорода H₂ при низких температурах. Эти эффекты представляют собой весьма наглядные *макроскопические* проявления таких своеобразных *квантовых* законов, как принцип Паули, запреты переходов и, наконец, наличие спина у протона. Конечно, и здесь существует (весьма малая) вероятность переходов между пара- и ортосостояниями, приводящая к появлению слабых спектральных линий. По этим вопросам и в связи с полосатыми спектрами двухатомных

молекул см. монографию А. Зоммерфельда, «Строение атома и спектры» (т. I, стр. 488 и далее, т. II, стр. 553), а также книгу Э. Ферми, «Молекулы и кристаллы».

К стр. 205 ()*. Рассмотренные выше соотношения касаются одночастичного состояния, хотя нетрудно было бы рассмотреть случай системы N частиц. Тогда было бы полезно вновь ввести *числа заполнения*, с помощью которых удобно дать предварительное определение понятия физического вакуума. В этом смысле вакуумом можно назвать такое состояние, при котором все числа заполнения, соответствующие реальным частицам, равны нулю. Читатель заметит осторожность выражения «реальные частицы»; дело в том, что состояния с отрицательными энергиями не имеют непосредственного физического смысла, и Дирак предложил считать электроны с $E < 0$ *принципиально ненаблюдаемыми*. Говоря о различных значениях чисел заполнения, мы апеллируем уже к теории с переменным числом частиц — к квантовой теории поля (вторичное квантование!), где и дается наиболее полное определение понятия физического вакуума (см., например, Н. Н. Боголюбов и Д. В. Ширков, «Введение в теорию квантованных полей», М., 1957, стр. 75; С. Швебер, «Введение в релятивистскую квантовую теорию поля», ИЛ, 1963, стр. 135, 216, 245, 616).

Если, следуя Дираку, считать ненаблюдаемыми все электроны отрицательных энергий, то, во-первых, устраняется трудность, связанная с принципом минимума энергии. Именно, если бы состояния с $E < 0$ были свободны, а с $E > 0$ имелось хотя бы одно занятое состояние, то электрон стремился бы перейти оттуда в состояние с $E < 0$, причем $E \rightarrow -\infty$, а $|p| \rightarrow +\infty$ [см. (34.25)], и мы пришли бы к бессмысленному результату (самоускорению электронов!). Следует заметить, что в классической теории указанная трудность отсутствует, так как между уровнями $E > 0$ и $E < 0$ существует свободный интервал $\Delta E = 2mc^2$, а дискретные скачки энергии в классических системах невозможны. С другой стороны, возможно (затратив соответствующее количество энергии) «вырвать», например, один электрон из состояния с $E < 0$ и придать ему положительную энергию, так что он *станет наблюдаемым*. (Здесь содержится неявное предположение о «косвенной» наблюдаемости и электронов с отрицательной энергией ввиду существования взаимодействия, переводящего их на положительные энергетические уровни.) Одновременно на фоне вакуума появится «дырка», которая будет вести себя во всех отношениях как частица с $E > 0$, но

знака заряда, противоположного знаку заряда электрона (см. рис. 32). Электрон и «дырка» могут снова встретиться и электрон вновь попадет на уровень с $E < 0$, став тогда ненаблюдаемым (аннигиляция); при этом будет излучен фотон (к тому же не один, а по крайней мере два или три), унося затраченную вначале энергию.

*К стр. 215 (**).* «Море» ненаблюдаемых электронов Дирака с отрицательной энергией. В нем изображена одна «дырка» — позитрон: в области положительной энергии виден один электрон, вырванный из ненаблюдаемого состояния (пара электрон-позитрон).

К стр. 211 ().* Здесь полезно воспользоваться свойством $\sigma_i \sigma_k = \delta_k^i I + i \varepsilon_{ikl} \sigma_l$, где ε_{ikl} — 3-мерный символ Леви-Чивита (см. комментарии к стр. 77 и 112).

К стр. 218 ().* Здесь существенно предположение о независимости матриц Дирака γ^μ от выбора системы отсчета. Другая формулировка теории Дирака была предложена А. Зоммерфельдом (см. «Строение атома и спектры», т. II, стр. 220 и далее).

*К стр. 218 (**).* Мы изменили выражение (37.3) ($T \rightarrow T^{-1}$), чтобы сохранить форму дальнейших рассуждений автора, однако ниже в аналогичном случае формула, предшествующая (37.32) и последующие формулы оставлены без изменений, так как это не отражается на полученных результатах.

К стр. 227 ().* Последний результат важен для квантовой теории поля и является основой альтернативы «дырочной» интерпретации позитрона. Тогда оказывается, что последовательный учет статистики Ферми–Дирака приводит к положительно определенной энергии электронно-позитронного поля, в то время как знак заряда этого поля становится неопределенным (без учета принципа Паули все было бы наоборот!). Поэтому уже нет необходимости вводить гипотезу о «море» ненаблюдаемых электронов отрицательной энергии.

Лагранжиан свободного электронно-позитронного поля имеет вид

$$\mathcal{L}_{sp} = -\frac{\hbar c}{2} \left(\bar{\psi} \gamma^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} - \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x^\mu} \gamma^\mu \psi \right) - mc^2 \bar{\psi} \psi.$$

Для учета взаимодействия с электромагнитным полем к нему следует добавить лагранжиан взаимодействия

$$\mathcal{L}_{int} = ie \bar{\psi} \gamma^\mu \psi A_\mu.$$

Варьируя полный интеграл действия, получим уравнение (37.1) и сопряженное ему. Легко проверить, что в силу этих уравнений полный лагранжиан электронно-позитронного поля обращается в нуль.

Последние вопросы, рассмотренные Ферми в его лекциях, чаще излагаются в курсах квантовой теории поля, с которой связано и все их дальнейшее развитие (см. многочисленные курсы и монографии по квантовой электродинамике и квантовой теории поля).

Энрико Ферми

ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Дизайнер: М. В. Ботя

Технический редактор: А. В. Широбоков

Компьютерный набор и верстка: О. В. Максимова

М. А. Килин

Компьютерная графика: В. Г. Бахтиев

Корректоры: Е. Ф. Осипова, А. В. Пигузова

Подписано к печати 21.04.00. Формат $60 \times 84\frac{1}{16}$.

Усл. печ. л. 14,42. Уч. изд. л. 14,73.

Гарнитура Computer Modern Roman. Бумага офсетная № 1.

Печать офсетная. Заказ № . Тираж 1000 экз.

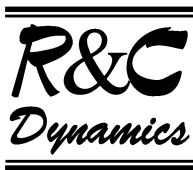
Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика»

426057, г. Ижевск, ул. Пастухова, 13.

Лицензия на издательскую деятельность ЛУ №084 от 03.04.00.

Отпечатано с готовых диапозитивов

в ГИПП «Вятка», 610044, г. Киров, ул. Московская, 122.



426057, Россия, г. Ижевск, ул. Пастухова, 13
НИИЦ "РХД"
Тел.: (3412) 76-82-95, 78-39-33
E-mail: borisov@uni.udm.ru
<http://www.red.com.ru>

Уважаемые читатели и авторы.

Научно-издательский центр

«Регулярная и хаотическая динамика»

- специализируется на выпуске учебной и научной литературы, в том числе монографий, журналов;
- издает дополнительную учебную литературу для школ и высших учебных заведений физико-математического профиля;
- переводит книги естественно-научного направления;
- развивает направление, связанное с использованием сети Internet и внедрением новых информационных технологий в издательское дело: обучающие программные комплексы, электронные учебники, журналы, книги и энциклопедии.

Наши партнеры:

- Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова;
- Российский фонд фундаментальных исследований;
- Физико-технологический институт Академии наук;
- Саратовский учебно-научный центр «Колледж»;
- Издательство Tigrion (Великобритания);
- Удмуртский государственный университет.