

023/07
4-559



Учебно-
методические
пособия
Учебно-научного
центра ОИЯИ
Дубна

УНЦ-2006-29

И. Н. Мешков, А. О. Сидорин

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКИ
И АТОМНОЙ ФИЗИКИ

2006

Учебно-научный центр ОИЯИ

C 323(07)
M-559

И. Н. Мешков, А. О. Сидорин

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И АТОМНОЙ ФИЗИКИ

Учебное пособие

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛДубна 2006

+ C 331071

*Учебное пособие написано профессором базовой кафедры МИРЭА
«Электроника физических установок» при УНЦ ОИЯИ
И. Н. Мешковым (ОИЯИ) и доцентом А. О. Сидориным
и рекомендовано к изданию экспертной комиссией УНЦ ОИЯИ
и редакционно-издательским советом МИРЭА.*

Рецензенты: профессор А. Д. Суханов, доцент А. В. Чижов

Мешков И. Н., Сидорин А. О.

Основы квантовой механики и атомной физики: Учебное пособие. —
Дубна: ОИЯИ, 2006. — 337 с.: ил., 1 л. цв. ил.

Учебное пособие содержит изложение основ квантовой механики, начиная с описания экспериментальных факторов, стимулировавших появление знаменитых постулатов Н. Бора и его «старой» квантовой механики, основ волновой механики и вероятностного подхода, основных явлений в физике атома.

Пособие предназначено для студентов и аспирантов инженерных и физических специальностей.

Meshkov I. N., Sidorin A. O.

The basic course of quantum mechanics and atomic physics: Textbook. —
Dubna: JINR, 2006. — 337 p.: ill., 1 l. col. ill.

The textbook contains a description of the basic principles of quantum mechanics beginning with the experimental facts which stimulated formulation of famous postulates of N. Bohr and his «old» quantum mechanics, description of wave mechanics, the probability approach, basic phenomena in atomic physics.

The book is addressed to the students and doctoral students specializing in engineering and physics.

Оглавление

Предисловие	7
ВВЕДЕНИЕ	
ГЛАВА 1. ФИЗИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ, СТИМУЛИРОВАВШИЕ ВОЗНИКНОВЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ	8
§ 1.1. Открытие электрона	8
§ 1.2. Открытие радиоактивности	11
§ 1.3. Опыт Резерфорда и планетарная модель атома	12
§ 1.4. Атомарные спектры	14
ГЛАВА 2. КВАНТОВЫЕ ПОСТУЛАТЫ БОРА. АТОМ БОРА	16
§ 2.1. Постулаты Бора	16
§ 2.2. Модель атома Бора	17
ЧАСТЬ I. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ	21
ГЛАВА 3. ДУАЛИЗМ ЧАСТИЦ В ПРИРОДЕ	21
§ 3.1. Квантовая теория фотоэффекта	21
§ 3.2. Эффект Комптона	22
§ 3.3. Дифракция электрона на кристаллической решётке: опыт Девиссона–Джермера	24
ГЛАВА 4. ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ	25
§ 4.1. Существо гипотезы де Бройля	26
§ 4.2. Волновая функция	27
§ 4.3. Волновой пакет. Фазовая и групповая скорости	28
§ 4.4. Дельта-функция Дирака	29
§ 4.5. Расплывание волнового пакета	31
ГЛАВА 5. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА	38
§ 5.1. Неопределённость значений координаты и импульса частицы	38
§ 5.2. Соотношение неопределённостей энергии и времени	39
§ 5.3. Принцип дополнительности	39
ГЛАВА 6. ВОЛНОВАЯ МЕХАНИКА. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА	43
§ 6.1. Волновое уравнение и уравнение Шрёдингера	43
§ 6.2. Волновая функция — «волна вероятности»	47
§ 6.3. Принцип суперпозиции состояний	51
ГЛАВА 7. ПРИМЕНЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА	53
§ 7.1. Плотность потока вероятности	53
§ 7.2. Прохождение потенциального барьера. Туннельный эффект	61
§ 7.3. Метод ВКБ	67

§ 7.4. α -распад	72
§ 7.5. Частица в потенциальной яме	76
§ 7.6. Нейтрон в гравитационном поле	82
§ 7.7. Квантовый осциллятор	88
ГЛАВА 8. ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ	96
§ 8.1. Операторы координаты и импульса	96
§ 8.2. Оператор энергии	99
§ 8.3. Оператор Гамильтона и уравнение Шрёдингера	100
§ 8.4. Собственные функции и собственные значения операторов	100
§ 8.5. Коммутатор операторов и соотношения неопределенностей	105
§ 8.6. Производные операторов по времени	107
ГЛАВА 9. СИММЕТРИИ В ПРИРОДЕ	111
§ 9.1. Операция инверсии и симметрия волновой функции	111
§ 9.2. Оператор инверсии	112
§ 9.3. Закон сохранения чётности и его нарушение	112
§ 9.4. Комбинированная чётность. <i>CPT</i> -теорема	120
ГЛАВА 10. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА	123
§ 10.1. Оператор момента импульса	123
§ 10.2. Собственные функции и собственные значения оператора \hat{L}_z	127
§ 10.3. Операторы \hat{L}_x, \hat{L}_y . Выбор осей. Значение L^2	128
§ 10.4. Собственные функции оператора \hat{L}^2	131
§ 10.5. Правила сложения моментов	133
ГЛАВА 11. СПИН	138
§ 11.1. Гипотеза Уленбека и Гаудсмита. Спин частицы. Фермионы и бозоны. Полный момент частицы	138
§ 11.2. Оператор спина. Спин 1/2, спиноры	143
§ 11.3. Спин и магнитный момент частиц	148
§ 11.4. Уравнение Паули для заряженной частицы со спином в магнитном поле	151
§ 11.5. Заряженная частица со спином в однородном магнитном поле	154
§ 11.6. Электрически нейтральная частица со спином, покоящаяся в магнитном поле. Опыт Штерна-Герлаха	157
ГЛАВА 12. ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ	166
§ 12.1. Принцип неразличимости тождественных частиц	166
§ 12.2. Принцип Паули	168
§ 12.3. Обменное взаимодействие	169

ЧАСТЬ II. ФИЗИКА АТОМОВ

ГЛАВА 13. ЭЛЕКТРОН В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ	172
§ 13.1. Уравнение Шрёдингера для задачи двух тел	172
§ 13.2. Атом водорода. Электрон в центральном поле	176
§ 13.3. Собственные функции и уровни энергии электрона в атоме водорода	184
§ 13.4. Водородоподобные атомы и ионы	195
ГЛАВА 14. ТОНКАЯ И СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА АТОМНЫХ СПЕКТРОВ	198
§ 14.1. Теория возмущений. Возмущения, не зависящие от времени	198
§ 14.2. Спин-орбитальное взаимодействие и тонкая структура атомных уровней	203
§ 14.3. Сверхтонкая структура атомных уровней	216
§ 14.4. Лэмбовский сдвиг	231
§ 14.5. Структура нижних уровней атома водорода	233
§ 14.6. Структура уровней позитрония	238
ГЛАВА 15. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ	242
§ 15.1. Одночастичное приближение, эффективное поле. Сложные атомы	242
§ 15.2. Электронные конфигурации	244
§ 15.3. Суммарный момент атома	245
§ 15.4. Периодическая таблица элементов Д.И. Менделеева	247
ГЛАВА 16. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ, ЗАВИСЯЩИХ ОТ ВРЕМЕНИ	253
§ 16.1. Возмущения, зависящие от времени	253
§ 16.2. Периодическое возмущение в двухуровневой системе	254
§ 16.3. "Кратковременные" возмущения	257
§ 16.4. Электрические дипольные переходы. Правила отбора	260
§ 16.5. Квадрупольные электрические и дипольные магнитные переходы	270
§ 16.6. Вынужденное и спонтанное излучение атома. Коэффициенты Эйнштейна	273
§ 16.7. Усиление излучения в активной среде	278
§ 16.8. Квантовые усилители и генераторы	282
ГЛАВА 17. АТОМАРНЫЕ СПЕКТРЫ	284
§ 17.1. Линейчатый и сплошной спектры. Метастабильные состояния	284
§ 17.2. Время жизни состояния	285
§ 17.3. Ширина спектральных уровней и линий	286

ГЛАВА 18. АТОМ ВО ВНЕШНЕМ СТАТИЧЕСКОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ	282
§ 18.1. Эффект Зеемана	282
§ 18.2. Эффект Штарка	293
§ 18.3. Магнитный резонанс	295
ГЛАВА 19. АТОМНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ	299
§ 19.1. Оптическая и рентгеновская спектроскопия	299
§ 19.2. Микроволновая спектроскопия. Атомный интерферометр	302
§ 19.3. Атомная спектроскопия в статических полях	315
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	329
Атомные константы	330
Литература	333
Предметный указатель	334

Предисловие

Предлагаемое учебное пособие подготовлено к изданию кафедрой электроники физических установок Московского государственного института радиотехники, электроники и автоматики (МИРЭА), организованной в г. Дубне при Учебно-научном центре Объединенного института ядерных исследований, и предназначено для студентов очной формы обучения, специальность 200600 "Электроника физических установок".

Пособие ориентировано на преподаваемый в течение пяти семестров курс физики. Такой курс физики предполагает более углублённое, нежели в стандартных курсах для инженерных специальностей, изучение предмета. Вместе с тем материал и уровень его изложения не требуют специальной математической подготовки, поэтому пособие может быть рекомендовано студентам других инженерных специальностей и аспирантам.

Материал, представленный в пособии, имеет разную степень сложности. Часть параграфов, отмеченных символом "*", может быть опущена при первом чтении без потери целостности восприятия. Традиционно для авторов значительная часть материала представлена в виде задач, которые, хотя и снабжены решениями, предполагают более углублённый, нежели при чтении основного текста, подход читателя к его освоению.

Авторы пользуются возможностью выразить свою глубокую благодарность А.Д. Суханову, В.И. Лушикову, А.Я. Силенко, А.С. Сорину, А.В. Чижову и Е.Л. Ядровскому за ценные замечания и рекомендации по доработке пособия.

Авторы благодарны Т.А. Степановой за неоценимую помощь и большой труд по подготовке рукописи к изданию.

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1. ФИЗИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ, СТИМУЛИРОВАВШИЕ ВОЗНИКНОВЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовая механика, родившаяся в третьей декаде XX в., явилась революционной физической теорией, т.к. постулированные и развитые в ней законы природы не укладывались в "привычные" для того времени физические представления, основанные на практическом опыте. И, конечно, толчком к возникновению квантовых представлений послужили новые экспериментальные открытия (т.е. опыт!), сделанные в конце XIX – начале XX столетий.

Само название "квантовая механика" связано с законом излучения Планка (§ 1.4) и происходит от лат. *quantum* – сколько.

§ 1.1. Открытие электрона

В 1897 г. Дж. Дж. Томсон (*Joseph John Thomson*), изучая отклонение катодных лучей в скрещённых электрическом и магнитном полях (рис. 1.1), пришёл к выводу, что эти лучи состоят из легких отрицательно заряженных частиц. Он назвал их электронами, используя термин, введённый ещё в 1891 г. Дж. Стони (*G. Stoney*) для обозначения заряда отрицательных одновалентных ионов. Годом позже Дж. Дж. Томсон измерил отношение заряда к массе для электрона (задача 1.1) и нашёл его в 1836 раз меньше того же отношения для иона водорода (протона).

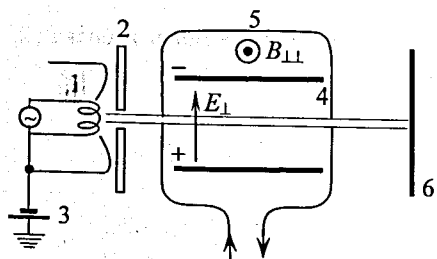


Рис. 1.1. Схема опыта Дж. Дж. Томсона

1 – катод (раскалённая нить) с прикатодным электродом, 2 – анод, 3 – источник ускоряющего напряжения, 4 – пластины вертикального электрического поля, 5 – витки катушки, создающей горизонтальное магнитное поле, 6 – люминесцентный экран

Задача 1.1. Найти скорость электрона, не отклонившегося в скрещённых электрическом и магнитном полях, если $E_{\perp} = 10$ кВ/см, $B_{\perp} = 30$ мТл.

В гауссовой системе

$$v = c \cdot \frac{E_{\perp}}{B_{\perp}} = c \cdot \frac{10^4/300}{300} = \frac{c}{9} \approx 3,3 \cdot 10^9 \text{ см/с.}$$

В системе СИ

$$v = \frac{E_{\perp}}{B_{\perp}} = \frac{10^4 \cdot 100}{30 \cdot 10^{-3}} \approx 3,3 \cdot 10^7 \text{ м/с.}$$

Зная скорость электронов и измеряя смещение Δx_{\perp} электронов на экране при выключенном магнитном поле B_{\perp} , из соотношения

$$\Delta x_{\perp} = \frac{e}{2m} E_{\perp} \cdot \left(\frac{\ell}{v}\right)^2$$

находим $\frac{e}{m}$, ℓ – длина области со скрещёнными полями.

Более точный метод измерения e/m основан на фокусировке пучка электронов в продольном магнитном поле (задача 1.2).

Задача 1.2. Электронный пучок из электронной пушки имеет угловой раствор $\theta \ll 1$. Электроны движутся в однородном магнитном поле, параллельном их средней скорости $\langle \vec{v} \rangle$, и поступают на люминесцентный экран. При каком значении магнитного поля на экране будет наблюдаться светящееся пятно минимального размера (фокусировка)? Энергия электронов 10 кэВ, расстояние от анода пушки до экрана $\ell = 30$ см. *Указание:* использовать гауссовы и атомные единицы.

В плоскости, перпендикулярной полю, траектория электронов – окружность радиусом (гауссовы единицы)

$$\rho = \frac{\theta pc}{eB}$$

Все электроны соберутся в "точку", сделав полный оборот за время

$$T = \frac{2\pi\rho}{v} = 2\pi \frac{\gamma mc}{eB}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}$$

Таким образом, фокусировка пучка на экране будет наблюдаться при

$$nT = \frac{\ell}{v} \quad \text{или} \quad B = 2\pi n \frac{pc}{e\ell}$$

При $\varepsilon_{\text{кин}} = 10$ кэВ скорость электрона в единицах СИ равна

$$\beta \approx \sqrt{2\varphi} \approx 0,2, \quad \varphi = \frac{\varepsilon_{\text{кин}}}{mc^2} \approx 0,02, \quad \gamma = 1 + \varphi \approx 1,0.$$

Отсюда

$$B = 2\pi \cdot n \frac{0,2 \cdot 0,51 \cdot 10^6}{300 \cdot 30} \approx 71,2 \cdot n \text{ Гс} = 7,12 \cdot n \text{ мТл}.$$

Первое прямое измерение заряда электрона было произведено американским физиком Р. Милликеном (*R. Millikan*) в серии экспериментов 1910–1914 гг. В этих экспериментах наблюдалось падение капелек жидкости (масла) в атмосфере между пластинами конденсатора (рис. 1.2), к которому приложено напряжение U порядка нескольких киловольт. Капельки облучались рентгеновским или гамма-излучением и заряжались. Напряжение U подбиралось так, чтобы скорость падения была постоянной, что соответствует равенству нулю суммы сил, действующих на заряженную каплю:

$$QE - mg - F_{\text{тр}} = 0, \quad (1.1)$$

где $F_{\text{тр}} = Kv$ – сила трения капли о воздух (сила Стокса, см. [1], § 9.6). Меняя заряд капли и измеряя изменение скорости, можно исключить силу веса:

$$\Delta Q = K \cdot \Delta v / E. \quad (1.2)$$

Оказалось, что в большом числе измерений величина ΔQ кратна некоторой постоянной e :

$$\Delta Q = ne, \quad n - \text{целое}.$$

Значение e , найденное Милликеном,

$$(e)_{\text{Millikan}} = 1,59 \cdot 10^{-19} \text{ К},$$

было очень близко к современной величине заряда электрона $e = 1,60 \cdot 10^{-19}$ К. Серьезной экспериментальной проблемой было независимое определение коэффициента K в силе Стокса, с чем Милликен успешно справился.

Задача 1.3. В опыте Милликена используются капельки масла радиусом $a = 3$ мкм. Оценить точность, с которой нужно измерять скорость падения капли, чтобы заметить изменение заряда капли на один электрон, если $E = 3$ кВ/см, $K = 6\pi\eta a$, $\eta = 1,8 \cdot 10^{-4}$ г/см·с – вязкость воздуха, плотность масла $0,9$ г/см³.

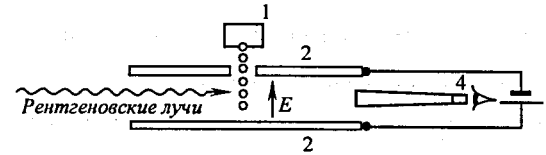


Рис. 1.2. Схема опыта Милликена.
1 – генератор капелек масла,
2 – обкладки конденсатора,
3 – источник высокого напряжения,
4 – зрительная труба

Из формулы (1.2) находим

$$(\Delta v)_{\text{мин}} = \frac{eE}{6\pi\eta a} = \frac{4,8 \cdot 10^{-10} \cdot 3 \cdot 10^3 / 300}{6\pi \cdot 1,8 \cdot 10^{-4} \cdot 3 \cdot 10^{-4}} = 47 \text{ мкм/с}.$$

Масса капли составляет примерно $1 \cdot 10^{-10}$ г, т.е. сила веса порядка 10^{-10} Н. Сила, действующая на каплю со стороны электрического поля при заряде $Q = Ne$, составляет примерно $5 \cdot 10^{-14}$ Н, т.е.

$$QE \ll mg.$$

Поэтому установившееся значение скорости определяется, в основном, балансом веса и трения:

$$v \sim \frac{mg}{6\pi\eta a} \sim \frac{10^{-10} \cdot 981}{6\pi \cdot 1,8 \cdot 10^{-4} \cdot 3 \cdot 10^{-4}} \approx 0,1 \text{ см/с}.$$

Таким образом, необходима точность измерения скорости падения капли

$$\frac{\Delta v}{v} \sim 5 \cdot 10^{-2}.$$

§ 1.2. Открытие радиоактивности

В 1896 г. А. Беккерель (*A. Becquerel*) обнаружил, что соли урана испускают неизвестное излучение, вызывающее почернение фотопластинок. Пропустив это излучение через поперечное магнитное поле, Пьер и Мария Кюри (*P. et M. Curie*) и, независимо, Эрнест Резерфорд (*E. Rutherford*) показали, что это излучение содержит три компонента: положительно ("α-лучи") и отрицательно ("β-лучи") заряженные частицы, отклонявшиеся в магнитном поле в противоположные стороны, и нейтральное ("γ-лучи") излучение, не отклонявшееся в поле. Позже

было понято, что α -лучи – это ядра атомов гелия, β -лучи – электроны, а γ -лучи – жесткое электромагнитное излучение, по своим свойствам не отличающееся от рентгеновских лучей (они отличаются только источниками: распад ядер или субъядерных частиц для γ -излучения и тормозное излучение быстрых электронов для рентгеновского излучения).

Открытия электрона и радиоактивности указывали на существование в природе *субатомных частиц* и, следовательно, на сложное строение атома. Но, пожалуй, ещё более важно, что радиоактивный распад указал на существование *вероятностных* (недетерминированных) *процессов* на микроуровне.

§ 1.3. Опыт Резерфорда и планетарная модель атома

Сразу же после открытия электрона, в 1898 г. Дж. Дж. Томсон предложил и модель строения атома, которая получила образное название "пирог" с изюмом". Тестом в этом "пироге" служило само внутриатомное пространство, которое, согласно модели, представляло собой однородный положительно заряженный шар. Электронам отводилась роль "изюмин", равномерно распределенных по объему атома. Когда атом не возбужден, электроны покоятся в положении равновесия. Гармонические колебания электронов, выведенных из состояния равновесия, приводят к излучению монохроматических волн, соответствующих разным линиям в спектре атома. Для атома водорода такая модель правильно предсказывала частоту одной из линий в спектре излучения. Однако для атомов с несколькими электронами эта модель сталкивалась с непреодолимой трудностью: на момент ее изобретения уже была доказана теорема Ирншоу, утверждающая, что любая система покоящихся зарядов в статических полях является неустойчивой. Чтобы обойти эту трудность, в 1904 г. Томсон модифицировал модель, предположив, что электроны отдельными группами могут вращаться внутри атома. Модель атома Томсона оставалась общепризнанной вплоть до 1911 г., когда Э. Резерфорд осуществил свой

знаменитый опыт по рассеянию α -частиц из радиоактивного источника на золотой фольге (рис. 1.3).

Характер зависимости числа рассеянных частиц от угла рассеяния указывал на наличие в атомах массивных точечных рассеивающих центров ([1], § 5.3), разделенных пустым пространством. Результаты опыта Резерфорда полностью противоречат модели Томсона: электроны не могут рассеивать альфа-частицы на большие углы ввиду малой массы. Даже предположение о том, что положительный заряд атома связан с равномерно распределенными по его объему положительно заряженными частицами, не спасает модель Томсона (задача 1.4). Основываясь на результатах опыта, Э. Резерфорд предложил планетарную модель атома – точечное положительно заряженное тяжелое ядро, окружённое облаком лёгких электронов.

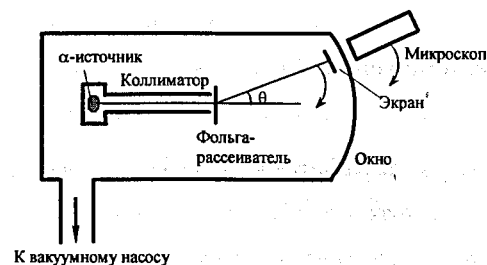


Рис. 1.3. Схема опыта Резерфорда

Задача 1.4. В опыте Резерфорда α -частицы с энергией около 5 МэВ рассеивались на атомах золота ^{197}Au . Что увидел бы Резерфорд, если бы атом был устроен в соответствии с моделью Дж. Дж. Томсона (электроны и протоны равномерно распределены по объёму атома)?

Прежде всего заметим, что для рассеяния на большие углы α -частицы должны сближаться с ядром на расстояние

$$r \sim \frac{z_{\alpha} z_{\text{Au}} e^2}{\epsilon} \sim \frac{2 \cdot 79 \cdot 4,8 \cdot 10^{-10}}{5 \cdot 10^6 / 300} \approx 4,5 \cdot 10^{-12} \text{ см,}$$

что существенно меньше расстояния между частицами в атоме по модели Дж. Дж. Томсона:

$$\Delta r = \left(\frac{4\pi R^3}{3A} \right)^{1/3} \sim 3 \cdot 10^{-9} \text{ см, } R \sim 10^{-8} \text{ см} \text{ – радиус атома, } A = 179 \text{ – атомный вес. Поэтому}$$

α -частицы взаимодействуют с отдельными протонами – парные столкновения. А в этом случае тяжёлая α -частица не может рассеяться на протоне на угол $\sim \pi/2$ (он вчетверо легче), т.е. характер рассеяния существенно "нерезерфордовский":

$$\sin \theta_{\max} = \frac{m_p}{m_\alpha} = \frac{1}{4}, \quad \theta_{\max} \approx 15^\circ.$$

Резерфорд понимал основную трудность предложенной модели, и в предисловии к своей статье в лондонском "Философском журнале" он предупреждает: "Вопрос об устойчивости такого атома на этой стадии не следует подвергать рассмотрению... Устойчивость окажется, очевидно, зависящей от тонких деталей структуры атома и составляющих его заряженных частей". Именно из-за проблемы устойчивости движения электронов вокруг ядра планетарная модель атома получила признание лишь в 1913 г. (см. гл. 2).

§ 1.4. Атомарные спектры

Оптическая спектроскопия, получившая развитие в конце XIX в., накопила богатые экспериментальные данные о спектрах излучения атомов. И важнейшим фактом было наличие так называемых *линейчатых спектров* излучения и поглощения вещества. Это означало, что атомы вещества способны испускать и поглощать квазимонохроматическое излучение.

Критическая ситуация сложилась в физике при попытке теоретического объяснения экспериментально найденного закона спектрального распределения равновесного излучения. Формула Рэля–Джинса, полученная к тому времени, согласовывалась с экспериментальными данными только в области малых частот. Кроме того, из нее следовал абсурдный вывод о том, что при любой температуре энергетическая светимость абсолютно черного тела и объемная плотность энергии равновесного излучения бесконечно велики. Этот результат известен сейчас под образным названием "ультрафиолетовая катастрофа". Проблема была решена в 1900 г., когда Макс Планк (*M. Planck*) сформулировал свой закон

излучения, положив, что вещество представляет собой совокупность резонаторов, излучающих на "своих" частотах свет в виде порций – *квантов*, имеющих энергию

$$\epsilon_{\text{quant}} = h\nu, \quad \text{где } h = 6,626\,075\,5(40) \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

– постоянная, введённая Планком и получившая его имя^{*)}. В квантовой физике удобно пользоваться также "перечёркнутой постоянной Планка" (или, как её коротко называют, "аш перечёркнутое" – от нем. h – аш):

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 6,58 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{с}.$$

Значение этой постоянной приведено здесь в атомных единицах, что значительно удобнее при численных оценках, чем единицы СИ.

Сегодня можно указать ещё один эффект, демонстрирующий квантовый характер излучения. Это свет звёзд. Если бы интенсивность излучения звезды падала с расстоянием в соответствии с классическим законом $1/r^2$, уровень излучения многих звёзд был бы ниже порога чувствительности глаз землян, и мы видели бы совсем иную картину неба. Тот факт, что в действительности мы видим очень далёкие звёзды, свидетельствует о "порционном" (квантовом!) характере излучения: в наши глаза фотоны попадают "целиком", хотя и с некоторой, падающей как $1/r^2$, вероятностью!

Уместно заметить, что механизм зрения человека также имеет квантовый характер: по измерениям, проведённым С.И. Вавиловым, предельная чувствительность глаза соответствует поглощению в сетчатке всего лишь около 10 квантов света. При этом в зрачок должно попасть около 100 квантов (т.е. эффективность регистрации света человеческим глазом порядка 10 %).

^{*)} Постоянную Планка называют ещё квантом действия, т.к. это "минимальная порция" механического действия $\Delta S = p \cdot \Delta x$, имеющего размерность произведения энергии на время.

ГЛАВА 2. КВАНТОВЫЕ ПОСТУЛАТЫ БОРА. АТОМ БОРА

§ 2.1. Постулаты Бора

Набор экспериментальных данных, описанных выше, нашёл своё объяснение в знаменитых постулатах Бора (*Niels Bohr*), сформулированных им в 1913 г.

1-й постулат: в атоме существуют стационарные орбиты электронов, находясь на которых электрон *не излучает*. Этот постулат снимал главную трудность планетарной модели атома Резерфорда – в соответствии с классической электродинамикой электрон, движущийся по криволинейной траектории, должен испускать электромагнитное излучение, а значит – терять энергию и "сваливаться" на ядро (за время порядка 10^{-11} с). 1-й постулат Бора снимал эту трудность, но не объяснял, конечно, природы стабильности орбит атомарных электронов. Это объяснение было дано позже, в рамках "новой", или волновой, механики, которую мы рассмотрим дальше (гл. 6). Там же мы увидим, что и сами орбиты электронов – классическое приближение, реально в атомах они не существуют.

2-й постулат: переходы электрона с одной стационарной орбиты на другую сопровождаются испусканием *фотонов – квантов излучения*, энергия которых равна разности значений энергии электрона на орбитах i и k :

$$\varepsilon_i - \varepsilon_k = h\nu_{ik} \equiv \hbar\omega_{ik}, \quad (2.1)$$

где $\omega_{ik} = 2\pi\nu_{ik}$ – (круговая) частота излучения. Тем самым получала объяснение природа линейчатых спектров и "резонаторов" Планка.

Заметим, что 2-й постулат противоречит 1-му: согласно ему электрон на стационарных орбитах поглощает или испускает кванты излучения. Поэтому правильнее в 1-м постулате говорить об излучении в *классическом* понимании.

§ 2.2. Модель атома Бора

Она может быть описана с помощью того же квазиклассического подхода. Уравнение движения электрона в поле ядра запишем в полярных координатах (r, α):

$$m\ddot{r} - m\frac{v^2}{r} = -\frac{Ze^2}{r^2}, \quad (2.2)$$

а закон сохранения импульса электрона в этом (центральном!) поле в форме

$$mvr = n\hbar. \quad (2.3)$$

Это есть знаменитое *правило Бора квантования орбит*: момент импульса электрона на стационарных орбитах кратен \hbar . Здесь e, m – заряд и масса электрона, Ze – заряд ядра. Подставив скорость v из (2.3) в (2.2), найдем радиус стационарной орбиты ($\dot{r} = 0$):

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Z m e^2} \equiv \frac{n^2}{Z} R_{\text{Bohr}}, \quad (2.4)$$

$$R_{\text{Bohr}} = \frac{\hbar^2}{m e^2} = \frac{r_e}{\alpha^2} = 0,529177249(24) \cdot 10^{-8} \text{ см}. \quad (2.5)$$

(Строго говоря, численное значение R_{Bohr} дано для атома водорода с учётом *приведённой массы* электрона – см. § 13.1 ниже). Цифры в скобках дают экспериментальную ошибку двух последних значащих цифр величины R_{Bohr} . Напомним, что 10^{-8} см = 1 Å (ангстрем) – оптическая и атомная единица длины, введённая шведским физиком А. Ангстремом (*A.I. Ångström*, 1868 г.). Здесь использованы также мировые константы (универсальные постоянные):

классический радиус электрона

$$r_e = \frac{e^2}{m c^2} = 2,81794092(38) \cdot 10^{-13} \text{ см}$$

и постоянная тонкой структуры уровней атома

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (\alpha^{-1} = 137,0359895(81)).$$

Физический смысл этой важной константы мы выясним в § 14.2.

Уровни энергии атома. Иногда встречается старое название уровней энергии – спектральные термы, или просто термы (от греч. *therme* – тепло, жар). Это название возникло в спектроскопии, до появления теории Бора.

Ясно, что каждой стационарной орбите r_n соответствует свой уровень энергии ε_n . Зная радиус орбиты электрона, нетрудно вычислить его полную энергию:

$$\varepsilon_n = \frac{mv_n^2}{2} - \frac{Ze^2}{r_n} = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r_n} - \frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r_n}. \quad (2.6)$$

Здесь n – номер орбиты. Как мы видим, энергия отрицательна и значение модуля энергии убывает с номером n как n^2 :

$$\varepsilon_n = \frac{\varepsilon_1}{n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot \varepsilon_0, \quad (2.7)$$

где

$$\varepsilon_0 = \frac{e^2}{2R_{\text{Bohr}}} = \frac{e \cdot 4,8 \cdot 10^{-10}}{2 \cdot 0,53 \cdot 10^{-8}} \cdot 300 = 13,605\,6981(40) \text{ эВ}. \quad (2.8)$$

Таким образом, введено понятие *уровня энергии*. ε_0 – абсолютное значение энергии основного уровня (состояния) атома водорода, удобная и важная атомная константа. В атомной спектроскопии используют ещё одну константу – *постоянную Ридберга* (*J.R. Rydberg*, 1890 г.):

$$Ry = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3} = 10973731,534(13) \text{ м}^{-1}. \quad (2.9)$$

Смысл этой постоянной легко понять, заметив, что

$$\varepsilon_0 = Ry \cdot 2\pi\hbar c \equiv \frac{mc^2}{2} \cdot \alpha^2.$$

Иногда эту константу называют *энергией Ридберга*. Величина, обратная постоянной Ридберга, равна

$$\lambda_1 = \frac{2\pi c}{\omega_1} = \frac{2\pi\hbar c}{\varepsilon_0} = \frac{1}{Ry}.$$

Таким образом, постоянная Ридберга численно равна обратной величине длины волны фотона, энергия которого равна энергии первого уровня. Заметим, что в

спектроскопии часто принято измерять энергию уровней в "обратных длинах волн" ($[m^{-1}]$).

Из (2.7) следует важное свойство структуры уровней атома водорода – расстояние между соседними уровнями быстро уменьшается с номером уровня:

$$\Delta\varepsilon_{n, n+1} = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \cdot |\varepsilon_1| \xrightarrow{n \gg 1} \frac{2\varepsilon_1}{n^3}. \quad (2.10)$$

Триумфом теории Бора, или, как её называют, "*старой*" квантовой механики было, безусловно, объяснение основных закономерностей атомных спектров (оптических и рентгеновских) и объяснение природы периодической таблицы элементов (которую Д.И. Менделеев построил в 1869 г., основываясь на химических свойствах элементов). Вместе с тем теория Бора, имевшая качественный ("полуколичественный") характер, довольно быстро натолкнулась на трудности при попытке объяснения структуры сложных атомов и простейших молекул, даже таких, как атом He и молекула H₂.

Следует указать ещё на одно противоречие этой теории (которое, конечно, признавал сам Бор). Из сохранения момента частицы в поле центральных сил немедленно следует, что её орбита плоская, и положение плоскости орбиты в пространстве сохраняется. Однако из эксперимента известно, что атом – трёхмерное образование ("шарик")! Поэтому постулат (2.3) противоречит экспериментальным данным.

Первое экспериментальное подтверждение теории Бора дали опыты Франка и Герца (*J. Franck, G. Hertz* – 1913 г.), продемонстрировавшие дискретность атомных уровней: прохождение пучка электронов через пары ртути сопровождалось, при изменении энергии электронов, скачками тока пучка, достигавшего коллектора, когда энергия электронов соответствовала значениям потенциалов возбуждения (рис. 2.1).

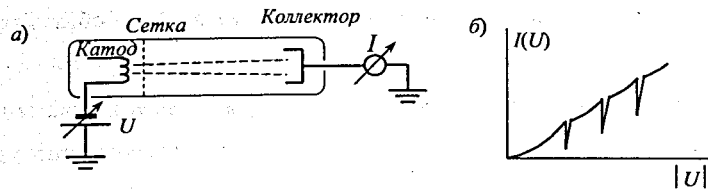


Рис. 2.1. Схема опыта Франка–Герца:

а) электроны из накаливаемого катода ускоряются до энергии eU и проходят через пары ртути в пространстве сетка–коллектор; б) экспериментальная зависимость $I(U)$ имеет вид кривой с несколькими минимумами, соответствующими разности энергий уровней атомов ртути

Задача 2.1. Оценить значение электрического поля, в котором атом водорода, находящийся в n -м возбуждённом состоянии, ионизируется.

Энергия электрона, находящегося на орбите радиусом r в атоме Бора, помещённом в электрическое поле E , есть (см. (2.7))

$$\varepsilon(r) \approx -\frac{e^2}{2r} + e \cdot E \cdot r.$$

Из условия ионизации $\varepsilon > 0$ следует

$$E_{\text{ionization}} = \frac{e}{2r^2} \sim \frac{e}{2r_n^2},$$

где r_n – радиус n -й боровской орбиты. С учётом (2.4) найдём

$$E_{\text{ionization}} \sim \frac{e}{2R_{\text{Bohr}}^2 \cdot n^4} \approx \frac{3 \cdot 10^9}{n^4} \text{ В/см.} \quad (2.11)$$

Такая сильная зависимость от n позволяет ионизовать атомы, находящиеся в возбуждённых состояниях: уже при $n = 15$ достаточно создать электрическое поле порядка 60 кВ/см, что легко выполняется в вакуумных устройствах. Этот прием используется в атомной физике для анализа состояний атомов.

ЧАСТЬ I. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

ГЛАВА 3. ДУАЛИЗМ ЧАСТИЦ В ПРИРОДЕ

Нильс Бор, конечно же, понимал ограниченность предложенной им модели атома и, в частности, едва ли считал, что орбиты электронов – реально существующие траектории частиц. Он одним из первых осознал, что микромир "живёт" по своим, далёким от классических, законам. И на это указывали экспериментальные факты, появившиеся примерно в то же время. Они и послужили толчком к созданию "волновой" ("новой") квантовой механики.

§ 3.1. Квантовая теория фотоэффекта

Первым из эффектов, послуживших толчком к созданию квантовой механики, несомненно, следует считать фотоэффект, открытый ещё в 1887 г. Г. Герцем (*G. Hertz*), который обнаружил, что длина искры электрического разряда между двумя электродами возрастает при попадании света на электрод, находящийся под отрицательным потенциалом. Это явление было подробно исследовано А.Г. Столетовым (1888 г.), Ф. Ленардом (*Ph. Lenard*) и Дж. Дж. Томсоном (1889 г.), которые показали, что свет выбивает электроны из металла. Объяснение фотоэффекта было дано А. Эйнштейном (*A. Einstein*, 1905 г.) на основе квантовых представлений о природе света. И это было первое указание на то, что свет ведёт себя как набор частиц – фотонов, которые способны передавать энергию электронам вещества в соответствии с законами механики, как это происходит, например, при соударении шаров. Фотон здесь ведёт себя как частица, выбивая электроны из вещества, если его энергия $h\nu$ превышает энергию связи электрона в веществе.

§ 3.2. Эффект Комптона

Изучая рассеяние рентгеновских лучей в парафине, А. Комптон (A. Compton, 1922 г.) обнаружил, что длина волны рассеянного излучения возрастает в зависимости от угла рассеяния θ (рис. 3.1) на величину

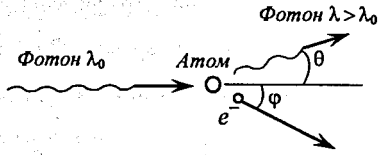


Рис. 3.1. Схема эффекта Комптона

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta), \quad \text{где } \lambda_c = \frac{h}{mc} \approx 2,43 \cdot 10^{-10} \text{ см} \quad (3.1)$$

— так называемая *комптоновская длина волны*. Этот результат не трудно получить, рассмотрев столкновение двух упругих "шаров" — частиц — фотона и покоящегося электрона (задача 3.1). В такой модели фотон ведет себя как *частица* с энергией $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\omega/c$.

Таким образом, оба экспериментальных факта указывают на *корпускулярные свойства фотона* (от лат. *corpusculum* — частица).

Задача 3.1. Получить формулу (3.1) для изменения длины волны фотона, рассеявшегося на электроне.

Из условия сохранения суммарных энергии и импульса частиц запишем (рис. 3.1)

$$\hbar\omega_0 + mc^2 = \hbar\omega + \sqrt{p^2c^2 + (mc^2)^2},$$

$$\hbar\omega_0 = pc \cdot \cos\varphi + \hbar\omega \cdot \cos\theta,$$

$$0 = pc \cdot \sin\varphi - \hbar\omega \cdot \sin\theta.$$

Здесь ω_0 и ω — частота излучения до и после соударения, p — импульс электрона отдачи. Обратим внимание на то, что в первом уравнении использовано выражение для полной (в релятивистском

смысле) энергии электрона. Здесь это принципиально, т.к. второй "участник" процесса соударения — фотон — всегда ультрарелятивистская частица (движущаяся со скоростью света c).

Исключим затем φ из второго и третьего уравнений. Найдём

$$p^2c^2 = \hbar^2[\omega_0^2 + \omega^2 - 2\omega\omega_0 \cdot \cos\theta]$$

и подставим в первое уравнение. Перенеся при этом $\hbar\omega$ в левую часть и возведя обе части равенства в квадрат, получим:

$$\omega_0 - \omega = \frac{\hbar}{mc^2} \cdot \omega\omega_0(1 - \cos\theta).$$

Подставив сюда

$$\omega_0 = \frac{2\pi c}{\lambda_0}, \quad \omega = \frac{2\pi c}{\lambda}, \quad \Delta\lambda = \lambda_0 - \lambda,$$

придём к результату (3.1).

Отметим, что максимальное изменение длины волны фотона имеет место при $\theta = \pi$ (отражение фотона назад):

$$\Delta\lambda_{\max} = 2\lambda_c.$$

При этом энергия отражённого фотона минимальна:

$$\varepsilon(\theta = \pi) = \hbar\omega(\theta = \pi) = \hbar \frac{2\pi c}{\lambda_0 + \Delta\lambda_{\max}} = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{2\hbar\omega_0}{mc^2}}.$$

Если энергия падающего фотона велика, так, что $\hbar\omega_0 \gg mc^2$, отражённый фотон имеет энергию

$$\varepsilon(\theta = \pi) \approx \frac{mc^2}{2},$$

а электрон приобретает энергию

$$\varepsilon_e = \sqrt{(p(\theta = \pi) \cdot c)^2 + (mc^2)^2} = \sqrt{\left(\hbar\omega_0 + \frac{mc^2}{2}\right)^2 + mc^2} \approx \hbar\omega_0 + \frac{mc^2}{2}.$$

Задача 3.2. Оценить максимальное значение длины волны фотона, при котором заметно проявление эффекта Комптона.

Из описания эффекта ясно, что фотон должен передать электрону часть своей энергии, превышающую энергию ионизации атома, т.е. (см. (2.8))

$$\Delta \mathcal{E} \sim 13,6 \text{ эВ.}$$

Минимальная энергия налетающего фотона должна быть

$$\mathcal{E}_{\min} \gg \Delta \mathcal{E},$$

что даёт

$$\lambda_{\max} = \frac{2\pi\hbar c}{\mathcal{E}_{\min}} \gg \frac{2\pi \cdot 6,58 \cdot 10^{-16} \cdot 3 \cdot 10^{10}}{13,6} \approx 900 \text{ \AA}.$$

Таким образом, эффект Комптона проявляется уже в далёком ультрафиолетовом и мягком рентгеновском излучении.

§ 3.3. Дифракция электрона на кристаллической решетке: опыт

Дэвиссона–Джермера

Этот эксперимент был поставлен американскими физиками К. Дэвиссоном и Л. Джермером (*C. Davisson, L. Germer*) в 1927 г., когда Луи де Бройль уже сформулировал свою гипотезу о волновых свойствах частиц (гл. 4). Поэтому фактически целью эксперимента была проверка этой гипотезы. В эксперименте измерялась зависимость тока электронов, отражённых кристаллом, от углов θ , φ (рис. 3.2). Было показано, что эта зависимость *повторяет закон* дифракции электромагнитной волны (рентгеновских лучей) на кристалле – закон Вульфа–Брэгга: сигнал гальванометра достигает максимума при

$$\varphi = \frac{\pi - \theta}{2} \text{ и } 2d \sin \varphi = n\lambda, \quad n = 1, 2, \dots$$

Это означает, что *частица* в данном эксперименте ведет себя как *волна*. Отметим, что картина, совершенно аналогичная показанной на рис. 3.2, б, была получена В. Фридрихом (*W. Fridrich*) и П. Книппингом (*P. Knipping*) ещё в 1912 г. при наблюдении дифракции рентгеновских лучей, проходящих сквозь кристаллическую плёнку. Постановку эксперимента предложил М. Лауэ (*M. Laue*), и с тех пор картина дифракции рентгеновских лучей, зарегистрированная по этому методу на фотопластинке, называется *лауэграммой*. В опыте Дэвиссона–Джермера электроны имели энергию 50–150 эВ (см. задачу 4.1 ниже).

Эксперименты, рассмотренные в этой главе, указывают на особенность микрочастиц, которую называют дуализм (от лат. *dualis* – двойственный) – способность частиц, в зависимости от условий (характеристик физического процесса, в котором они участвуют), проявлять своеобразные волновые свойства. Количественный критерий волновых либо корпускулярных свойств частицы позволила сформулировать гипотеза Л. де Бройля.

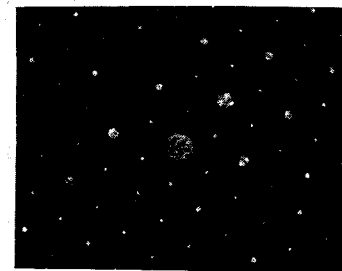
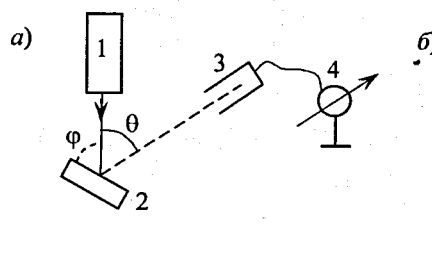


Рис. 3.2. а) Схема опыта Дэвиссона–Джермера: 1 – электронная пушка, 2 – кристалл, 3 – приёмник (коллектор) электронов, 4 – гальванометр;

б) дифракционная картина, полученная при прохождении пучка электронов ($E = 75 \text{ кВ}$, $\lambda = 0,05 \text{ \AA}$) сквозь монокристаллическую плёнку ZnSe с ориентацией (111)

ГЛАВА 4. ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ

В 1924 г. французский физик Луи де Бройль (*Louis de Broglie*) выдвинул гипотезу, согласно которой частица (электрон, протон, ядро атома, атом) обладает волновыми свойствами, т.е. ведёт себя так же, как электромагнитная волна, т.е. способна дифрагировать, огибая препятствия и проходя через отверстия. Первые экспериментальные подтверждения этой гипотезы появились, как мы видели в § 3.3, позднее. На идею "частица-волна" де Бройля натолкнула известная оптико-механическая аналогия: уравнения геометрической оптики (луча) аналогичны уравнениям механики (траекторий частицы).

§ 4.1. Существо гипотезы де Бройля

Как мы знаем, параметры частицы электромагнитного излучения – фотона связаны между собой соотношениями

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c}. \quad (4.1)$$

Здесь ε – энергия, \vec{p} – импульс, ω – частота, \vec{k} – волновой вектор, λ – длина волны. Таким образом, у фотона длина волны и импульса связаны равенством

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Можно предположить, что для частицы имеет место аналогичное равенство:

$$\lambda_{\text{particle}} = \frac{2\pi\hbar}{p_{\text{particle}}}.$$

Эту величину принято называть *длиной волны де Бройля* для частицы с импульсом p :

$$\lambda_D = \frac{h}{p}. \quad (4.2)$$

Обратим внимание, что здесь стоит $h = 2\pi\hbar$. Для фотона λ_D есть просто его длина волны.

Задача 4.1. Вычислить длину волны де Бройля для электрона с энергией $\varepsilon = 100$ эВ (опыт Дэвиссона–Джермера).

Здесь электроны нерелятивистские. Поэтому^{*)} в атомных единицах найдём

$$p = \sqrt{2m\varepsilon} = \sqrt{2 \cdot 0,5 \cdot 10^6 \cdot 10^2} = 10^4 \text{ эВ}/c,$$

где c – скорость света. Подставив в (4.2), имеем

$$\lambda = \frac{2\pi \cdot 6,6 \cdot 10^{-16}}{10^4} \cdot 3 \cdot 10^{10} \approx 1,2 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 1,2 \text{ \AA}.$$

^{*)} Условимся обозначать через ε кинетическую энергию частицы, т.е. $\varepsilon_{\text{total}} = \varepsilon + mc^2$.

Параметр λ_D является масштабом, определяющим границу между волновым и корпускулярным характером поведения частицы. Теперь ясно, что размер объекта, с которым взаимодействует частица, следует сравнивать именно с де-бройлевской длиной волны:

$$\begin{aligned} \lambda_D < \ell & - \text{частица,} \\ \lambda_D > \ell & - \text{волна.} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Так, в опыте Дэвиссона–Джермера волновые свойства электрона (дифракция) проявляются потому, что величина λ_D порядка периода кристаллической решётки ($\sim 1 \text{ \AA}$). И наоборот, фотон заведомо ведёт себя как частица, если длина волны излучения достаточно мала. Так, эффект Комптона при $\lambda \sim R_{\text{Bohr}}$ ($\varepsilon_{\text{photon}} \sim 10 \text{ кэВ}$) проявляется совершенно отчётливо (см. оценки в задаче 3.2).

§ 4.2. Волновая функция

В классической электродинамике вектор-потенциал и поле плоской волны электромагнитного излучения описываются известными выражениями

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \vec{A}_0 \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}, \quad \vec{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \\ \vec{H} &= [\vec{k}, \vec{E}] \end{aligned} \quad (4.4)$$

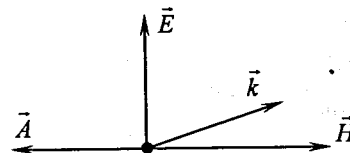


Рис. 4.1. Вектор-потенциал, поле и волновой вектор плоской электромагнитной волны

Мы видим, что каждая из величин \vec{A} , \vec{E} , \vec{H} имеет вид векторной функции:

$$\vec{\Psi}(\vec{r}, t) = \vec{\Psi}_0 \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}.$$

Подставив сюда из (4.1)

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \quad \omega = \frac{\varepsilon}{\hbar},$$

имеем для фотона

$$\bar{\psi}(\vec{r}, t) = \bar{\psi}_0 \cdot e^{i(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t)/\hbar}, \quad (4.5)$$

где ψ_0 – константа. Де Бройль использовал такое же выражение для описания движения частицы-волны. Введённую им функцию называют *волной де Бройля*.

§ 4.3. Волновой пакет. Фазовая и групповая скорости

Фаза волны (4.5) есть $\phi = \vec{k}\vec{r} - \omega t$. Отсюда находим *фазовую скорость* (т.е. скорость постоянной фазы):

$$\dot{\phi} = (\vec{k}, \vec{v}_\phi) - \omega = 0,$$

а поскольку волна распространяется вдоль направления вектора \vec{k} , то $\vec{v}_\phi \parallel \vec{k}$, следовательно

$$\vec{v}_\phi = \frac{\omega}{k} \cdot \frac{\vec{k}}{k}. \quad (4.6)$$

В случае суперпозиции нескольких волн – пакета волн с дисперсией (разбросом) частот $k(\omega)$, можно ввести *групповую скорость* пакета:

$$\vec{v}_g = \frac{d\omega}{dk} \cdot \frac{\vec{k}}{k}. \quad (4.7)$$

Все эти понятия известны из электродинамики. Для частицы по аналогии найдем (см. примечание в задаче 4.1):

$$\text{фазовая скорость: } v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{\epsilon_{\text{total}}/\hbar}{p/\hbar} = \frac{\epsilon_{\text{total}}}{p} = \frac{\gamma mc^2}{\gamma mv} = \frac{c^2}{v} \geq c, \quad (4.8)$$

$$\text{групповая скорость: } v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\epsilon_{\text{total}}}{dp} = \frac{2pc^2}{2\sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}} = \frac{\gamma mv \cdot c^2}{\gamma mc^2} = v. \quad (4.9)$$

Заметим, что точно такой же результат для v_g получается для нерелятивистской частицы:

$$v_g = \frac{d\epsilon_{\text{total}}}{dp} = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} + mc^2 \right) = \frac{p}{m} = v.$$

Таким образом, частице можно сопоставить пакет волн де Бройля с разными фазовыми скоростями, а в выражении для волны де Бройля (4.5) в качестве ϵ использовать кинетическую энергию. К этому вопросу мы вернёмся в § 6.1.

§ 4.4. Дельта-функция Дирака*

Естественно задать вопрос, что же такое волна де Бройля $\psi(\vec{r}, t)$? Волна плотности вещества? Например, принять, что $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \rho(\vec{r}, t)$ есть плотность вещества частицы. Но тогда для свободной частицы волна $\psi_0 e^{i(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t)/\hbar}$ даёт плотность, не зависящую от r : $\rho(\vec{r}, t) = \psi_0^2$, т.е. частица "размазана" по всему пространству. Можно попытаться обойти эту трудность, введя модуляцию функции плотности, например, в виде функции Гаусса:

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-r^2/2\Delta^2} \cdot e^{i(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t)/\hbar}. \quad (4.10)$$

Видимо в поисках описания частицы-волны Дирак ввёл свою знаменитую *дельта-функцию* (P.A.M. Dirac, 1926 г.). Это прекрасный пример того, как необходимость решения физической проблемы приводит к развитию математического аппарата.

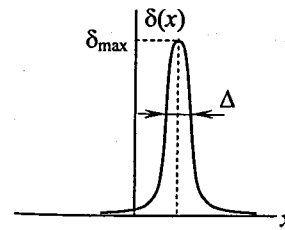


Рис. 4.2. Приближенное изображение δ -функции: $\delta_{\text{max}} \cdot \Delta = 1$

Дельта-функцию Дирак определил как "бесконечность в точке" (рис. 4.2):

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0, & x \neq x_0, \\ \infty, & x = x_0. \end{cases} \quad (4.11)$$

Но при этом бесконечность в определённом смысле ограничена: интеграл от δ -функции по интервалу, содержащему точку x_0 , конечен и равен единице:

$$\int_{x_1}^{x_2} \delta(x-x_0) \cdot dx = \begin{cases} 0, & \{x_1, x_2\} \notin x_0, \\ 1, & \{x_1, x_2\} \in x_0. \end{cases} \quad (4.12)$$

В этом случае говорят, что функция "нормирована на единицу". Нетрудно догадаться, что это модель точечной частицы с конечными зарядами и массой. В этом случае через δ -функцию выражаются (линейные) плотности этих величин:

$$\rho_e(x) = e \cdot \delta(x-x_0), \quad \rho(x) = m \cdot \delta(x-x_0)$$

Именно так и рассуждал Дирак. Введенная им δ -функция послужила толчком к развитию в математике теории обобщённых функций.

Обратим внимание на размерность $\delta(x)$ – это обратная длина.

Теперь сформулируем важнейшие свойства δ -функции:

$$1) \quad \int_{x_1}^{x_2} f(x) \cdot \delta(x-x_0) dx = \begin{cases} 0, & \{x_1, x_2\} \notin x_0, \\ f(x_0), & \{x_1, x_2\} \in x_0. \end{cases} \quad (4.13)$$

Это свойство следует из (4.12), если применить к (4.13) теорему о среднем (см. рис. 4.2).

$$2) \quad \delta(x) = \frac{1}{\pi} \cdot \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin \alpha x}{x}. \quad (4.14)$$

Чтобы убедиться в справедливости этого результата, достаточно заметить, что функция $f(x) = \sin \alpha x / x$ (рис. 4.3) имеет период

$$T_x = \frac{2\pi}{\alpha} \xrightarrow{\alpha \rightarrow \infty} 0,$$

и её максимум есть $f(0) = \frac{\alpha}{x}$. Отсюда

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \approx \frac{1}{2} \cdot f(0) \cdot \frac{2\pi}{\alpha} = \pi.$$

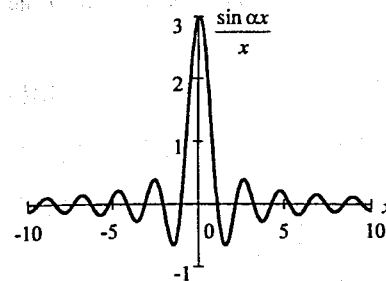


Рис. 4.3. График функции $f(x) = \frac{\sin \alpha x}{x}$, $\alpha = 3$

3) Фурье-образ δ -функции получим, вычислив интеграл

$$\delta(k) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \cdot e^{-ikx} dx.$$

Отсюда видно, что функция $\delta(k)$ – безразмерная. Воспользовавшись свойством δ -функции (4.13), найдём

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \cdot e^{ikx} \Big|_{x=0} = \frac{1}{2\pi}. \quad (4.15)$$

Отсюда, в частности, следует представление δ -функции в виде интеграла Фурье:

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(k) \cdot e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk. \quad (4.16)$$

В действительной форме это представление имеет вид

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos kx \cdot dk. \quad (4.17)$$

Нетрудно от одномерной δ -функции перейти к трёхмерной:

$$\delta(\vec{r} - r_0) = \delta(x-x_0) \cdot \delta(y-y_0) \cdot \delta(z-z_0).$$

§ 4.5. Расплывание волнового пакета*

Оказывается, что модуляция функции $\psi(\vec{r}, t)$ не спасает волну-частицу от "размазывания" – теперь это происходит со временем, волновой пакет

расплывается. Покажем это на примере одномерной модулированной волны, не уточняя пока её природу:

$$\psi(x, t) = f(x, t) \cdot e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}, \quad (4.18)$$

где функция $f(x, t)$ выбрана таким образом, что в начальный момент времени волна ограничена в пространстве (рис. 4.4):

$$\psi(x, 0) = A e^{-x^2/2\Delta^2} e^{ik_0 x}.$$

Здесь A – некоторая амплитуда волны, значение которой найдем позднее (см. задачу 6.2). Точно так же, как это делается в классической электродинамике, представим пакет (4.18) в виде суммы (интеграла Фурье) монохроматических ("монопимпульсных" в случае волны де Бройля) волн:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(k) \cdot e^{i(kx - \omega t)} dk. \quad (4.19)$$

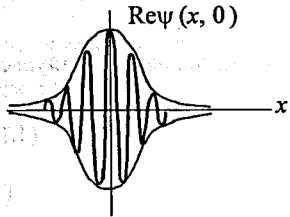


Рис. 4.4. Волновой пакет при $t=0$

Для нахождения амплитудной функции $\psi_k(k)$ запишем (4.19) в момент $t=0$:

$$\psi(x, 0) = A \cdot e^{-x^2/2\Delta^2} \cdot e^{ik_0 x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(k) \cdot e^{ikx} dk \quad (4.20)$$

и произведем обратное фурье-преобразование:

$$\psi_k(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) \cdot e^{-ikx} dx = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2\Delta^2} \cdot e^{i(k_0 - k)x} dx.$$

Вынесем из-под знака интеграла члены, не зависящие от x , для этого дополним показатель экспоненты до полного квадрата

$$-\frac{x^2}{2\Delta^2} + i(k_0 - k)x = -\frac{1}{2} \left(\frac{x}{\Delta} - i(k_0 - k)\Delta \right)^2 - \frac{(k_0 - k)^2 \cdot \Delta^2}{2}$$

и запишем

$$\psi_k(k) = \frac{A}{2\pi} \cdot \sqrt{2\Delta} \cdot e^{-(k_0 - k)^2 \Delta^2 / 2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi,$$

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\Delta} - i(k_0 - k)\Delta \right).$$

Вычислим интеграл, входящий в это выражение

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi,$$

возведя его в квадрат и преобразуя образующийся двойной интеграл к полярным координатам:

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \iint_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2 + y^2)} dx dy = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr d\phi = \pi.$$

Отсюда

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}. \quad (4.21)$$

Соответственно, амплитудная функция имеет вид

$$\psi_k(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \cdot \Delta \cdot e^{-(k_0 - k)^2 \Delta^2 / 2}. \quad (4.22)$$

Из этого выражения следует важный вывод: *ширина амплитудной функции* есть

$$\Delta k = \pm |k^* - k_0| \approx \pm \frac{1}{\Delta}, \quad (4.23)$$

где k^* – значение волнового числа, при котором показатель экспоненты в (4.22) равен единице. Таким образом, волновой пакет (4.18), ограниченный в пространстве (его характерная ширина $\pm\Delta$), обязательно имеет и разброс по волновым числам. Аналогичный результат можно получить для волнового пакета, ограниченного во времени: такой пакет обязательно имеет спектр частот и ширина этого спектра обратно пропорциональна характерной длительности

импульса. По отношению к волне де Бройля этот факт является фундаментальным квантово-механическим законом, формулировку которого отложим до гл. 5.

Подставив $\psi(k)$ (4.22) в (4.19), получим выражение для волнового пакета в виде интеграла монохроматических волн:

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \cdot \Delta \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{(k-k_0)^2 \Delta^2}{2}} \cdot e^{i(kx - \omega t)} dk. \quad (4.24)$$

Это есть не что иное, как фурье-разложение волнового пакета (4.18) по монохроматическим волнам. Поведение волнового пакета определяется видом дисперсионной зависимости и будет различным для разных видов волн. Например, для фотона в вакууме связь между частотой и волновым числом задается выражением

$$\omega = kc,$$

для свободной нерелятивистской частицы

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \omega = \frac{k^2 \hbar}{2m},$$

для свободной релятивистской частицы

$$\varepsilon^2 = p^2 c^2 + (mc^2)^2 \rightarrow \omega^2 = k^2 c^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2,$$

и поведение соответствующих волн будет различным. Однако расплывание волнового пакета может быть исследовано и в общем случае, для чего частоту волны разложим в ряд Тейлора в окрестности $k = k_0$

$$\omega = \omega_0 + \frac{d\omega}{dk}(k - k_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2\omega}{dk^2}(k - k_0)^2 + \dots \quad (4.25)$$

Теперь проследим за судьбой волнового пакета (4.24), для чего вычислим интеграл, подставив в него полученное выражение для частоты и учтя, что $d\omega/dk = v_g$.

Преобразуем суммарный показатель экспоненты:

$$\begin{aligned} & -\frac{(k - k_0)^2 \Delta^2}{2} + i \left(kx - \omega_0 t - v_g (k - k_0)t - \frac{1}{2} \frac{d^2\omega}{dk^2} (k - k_0)^2 t \right) = \\ & = -\frac{(k - k_0)^2}{2} \left(\Delta^2 + i \frac{d^2\omega}{dk^2} t \right) + i(k - k_0)(x - v_g t) + i(k_0 x - \omega_0 t). \end{aligned}$$

Вводя обозначение

$$\Delta(t) = \sqrt{\Delta^2 + i \frac{d^2\omega}{dk^2} t}, \quad (4.26)$$

два первых члена можно дополнить до полного квадрата, в результате получим

$$-\frac{1}{2} \left[(k - k_0) \Delta(t) - i \frac{x - v_g t}{\Delta(t)} \right]^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{x - v_g t}{\Delta(t)} \right)^2 + i(k_0 x - \omega_0 t).$$

Подставив это, довольно громоздкое, выражение в показатель экспоненты под интегралом в (4.24) и произведя замену переменных

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(k - k_0) \cdot \Delta(t) - i \frac{x - v_g t}{\Delta(t)} \right],$$

запишем

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\Delta}{\Delta(t)} \cdot e^{\frac{1}{2} \left(\frac{x - v_g t}{\Delta(t)} \right)^2 + i(k_0 x - \omega_0 t)} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi.$$

И, окончательно, учитывая значение интеграла (4.21), найдем

$$\psi(x, t) = A \cdot \frac{\Delta}{\Delta(t)} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{x - v_g t}{\Delta(t)} \right)^2 + i(k_0 x - \omega_0 t) \right\}. \quad (4.27)$$

Это и есть волновой пакет (4.18) в момент времени $t > 0$. Максимум функции $\psi(x, t)$ находится в точке $x(t) = v_g t$, которая смещается с групповой скоростью волны, а ширина пакета возрастает со временем:

$$\Delta \rightarrow \Delta(t).$$

Правда, $\Delta(t)$ – комплексная функция, и нужно ее представить в виде

$$\begin{aligned} \Delta(t) &= |\Delta(t)| \cdot e^{i\alpha(t)/2}, \\ \text{где } |\Delta(t)| &= \left[\Delta^4 + \left(\frac{d^2\omega}{dk^2} t \right)^2 \right]^{1/4}, \quad \text{tg} \alpha(t) = \frac{d^2\omega}{dk^2} \frac{t}{\Delta^2}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Таким образом, волновой пакет расплывается так, что его ширина $\Delta(t)$ удваивается за характерное время

$$\tau \sim 4 \cdot \frac{\Delta^2}{d^2\omega/dk^2}. \quad (4.29)$$

Кроме того, появляется переменный во времени фазовый множитель $e^{i\omega t/2}$. Случай стационарной во времени ширины волнового пакета соответствует условию

$$\frac{d^2\omega}{dk^2} = 0,$$

или $\omega = C_1 k + C_2$, где C_1 и C_2 — некоторые константы. С другой стороны, из физических соображений можно утверждать, что пакет не расплывается, когда фазовая скорость монохроматических волн совпадает с групповой скоростью пакета:

$$\frac{\omega}{k} = \frac{d\omega}{dk},$$

откуда следует, что $C_2 = 0$ и $\omega = C_1 k$. Такой вид дисперсионная зависимость имеет для релятивистской частицы с нулевой массой покоя (в частном случае для фотона) и $C_1 = c$. Для релятивистской частицы с массой, отличной от нуля, групповая скорость пакета совпадает со скоростью частицы (формула (4.9)), а время расплывания пакета может быть определено из вида дисперсионной зависимости

$$\omega = \sqrt{k^2 c^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2}, \quad \frac{d\omega}{dk} = \frac{kc^2}{\sqrt{k^2 c^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2}},$$

$$\frac{d^2\omega}{dk^2} = \frac{c^2 \left[k^2 c^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2 \right] - k^2 c^4}{\left[k^2 c^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2 \right]^{3/2}} = \frac{\hbar c^2 (\varepsilon^2 - p^2 c^2)}{\varepsilon^3} = \frac{\hbar c^2 (mc^2)^2}{(mc^2 \gamma)^3} = \frac{\hbar}{m \gamma^3},$$

соответственно

$$\tau_{rel} \sim 4 \cdot \frac{m \gamma^3 \Delta^2}{\hbar}. \quad (4.30)$$

Для нерелятивистской частицы $\omega = \frac{k^2 \hbar}{2m}$, откуда получаем $\frac{d^2\omega}{dk^2} = \frac{\hbar}{m}$ и для времени расплывания пакета имеем

$$\tau \sim 4 \cdot \frac{m \Delta^2}{\hbar}. \quad (4.31)$$

Это же выражение может быть получено из (4.30) при предельном переходе $\gamma \rightarrow 1$.

Задача 4.2. Оценить время расплывания де-бройлевского пакета для протона (размер протона $\Delta \sim 10^{-13}$ см).

$$\tau \sim 4 \cdot \frac{m_p c^2}{\hbar} \cdot \left(\frac{\Delta}{c}\right)^2 \sim 4 \cdot \frac{938 \cdot 10^6 \text{ эВ}}{6,6 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{с}} \cdot \left(\frac{10^{-13} \text{ см}}{3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}}\right)^2 \sim 10^{-22} \text{ с}.$$

За такое время свет проходит путь, примерно равный тридцати размерам протона.

Таким образом, группа волн $\psi(\vec{r}, t)$ движется со скоростью частицы, а волновой пакет расплывается за чрезвычайно короткое время. Результат, полученный здесь при рассмотрении движения "гауссового" пакета (4.18), является достаточно общим (см. [1], с. 248–250): пакет смещается со скоростью частицы и расплывается в пространстве по мере продвижения. В этом и состоит главная трудность де-бройлевского подхода: трудно объяснить, что же такое эта волна, "описывающая" движение частицы. Успешное объяснение волновых свойств частицы сопровождается непреодолимыми трудностями при попытке описать движение частицы в пространстве, даже свободном от "препятствий".

ГЛАВА 5. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТЕЙ

ГЕЙЗЕНБЕРГА

§ 5.1. Неопределенность значений координаты и импульса частицы

Первый "намёк" на необычное поведение частицы при попытке измерить одновременно значения её координаты и импульса мы получили при анализе распространения одномерного волнового пакета (4.18): ограничение волновой функции в пространстве ($\Delta x \sim \Delta$ в (4.18)) привело немедленно к ограничению значений импульса (4.24):

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x}. \quad (5.1)$$

К такому результату пришел В. Гейзенберг, анализируя мысленный эксперимент по измерению координаты частицы с помощью "гамма-микроскопа", т.е. по рассеянию фотонов на частице (*W. Heisenberg, 1927 г.*). С тех пор неравенство (5.1) носит название соотношения неопределенностей Гейзенберга.

Это неравенство вскоре было строго доказано на основе квантово-механического подхода и развитого к тому времени аппарата операторов в квантовой механике (*H.P. Robertson, 1929 г.*).

Результат (5.1) становится понятным, как только мы вспомним о волновых свойствах частицы. Действительно, для любой волны существует соотношение между её протяженностью (шириной функции в пространстве) и шириной спектра волновых чисел

$$\Delta k \cdot \Delta x \sim \pi, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (5.2)$$

известное из акустики и электродинамики ещё до возникновения квантовой механики. Этот результат следует немедленно из спектрального (фурье-) анализа сигналов, в чем мы, собственно, и убедились в § 4.5. Подставляя в (5.2)

$$\lambda_D = \frac{2\pi\hbar}{p},$$

найдем

$$\Delta k = -2\pi \frac{\Delta \lambda_D}{\lambda_D^2} = \frac{\Delta p}{\hbar}, \quad \text{или} \quad \Delta p \cdot \Delta x \sim \pi \hbar.$$

Строгий результат, записанный в традиционной форме, имеет вид

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar. \quad (5.3)$$

Ясно, что в трехмерном случае имеют место три аналогичных неравенства для всех трёх степеней свободы.

§ 5.2. Соотношение неопределенностей энергии и времени

Используя, аналогично (5.2), утверждение об ограниченности спектра волнового сигнала конечной длительности

$$\Delta \omega \cdot \Delta t \sim \pi,$$

немедленно приходим к соотношению между неопределенностями значений энергии частицы-волны $\epsilon = \hbar \omega$ и длительности измерения этой энергии:

$$\Delta \epsilon \cdot \Delta t \sim \pi \hbar,$$

которое принято записывать в форме, аналогичной (5.3):

$$\Delta \epsilon \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (5.4)$$

§ 5.3. Принцип дополнительности

Соотношения неопределенностей имеют фундаментальный характер. По существу, это математическая формулировка *принципа дополнительности* Бора (*N. Bohr, 1927 г.*). Сам принцип в разное время трактовался несколько по-разному. В одном из вариантов измерительный прибор и объект рассматривались как единая квантово-механическая система, вследствие чего любое измерительное устройство воздействует на исследуемый объект, изменяя его состояние.

Современная трактовка более категорична: в соответствии с соотношениями неопределенности получение информации (измерение) об одних параметрах квантового объекта неизбежно сопровождается частичной потерей

информации о других параметрах (связанных с первыми параметрами соотношениями неопределенностей). Такова "плата" в природе за получение информации.

Задача 5.1. Оценить квантово-механический предел точности измерения импульса электрона по радиусу кривизны его траектории в магнитном поле. Численные оценки проделать для электронов в большом электрон-позитронном коллайдере (Large Electron-Positron Collider – LEP), приняв энергию электронов примерно равной 100 ГэВ и радиус кривизны траектории 2,8 км.

Импульс частицы и радиус кривизны её траектории в магнитном поле связаны соотношением, которое следует из равенства

$$\gamma \frac{mv^2}{R} = \frac{e}{c} vB,$$

откуда

$$pc = eBR, \quad \text{где } p = \gamma mv. \quad (5.5)$$

Если R измеряется с ошибкой ΔR , то, очевидно, точность измерения импульса (считая, что поле известно с абсолютной точностью) есть

$$\Delta p = \frac{eB \cdot \Delta R}{c}.$$

С другой стороны, согласно (5.3) $\Delta p \geq \hbar/\Delta R$. Исключив из обоих соотношений ΔR , с помощью (5.5) и B найдем

$$\Delta p \geq \sqrt{\frac{\hbar p}{R}}. \quad (5.6)$$

Соответственно, значение R можно, не чувствуя квантовых ограничений, измерять с точностью

$$\Delta R \sim \sqrt{\frac{\hbar R}{p}}. \quad (5.7)$$

Подстановка значений p и R дает

$$\Delta \epsilon \approx \Delta p \cdot c \geq \sqrt{\frac{6,6 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot c \cdot 10^{11} \text{ эВ} \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}}{2,8 \cdot 10^5 \text{ см}}} \approx 2,7 \text{ эВ},$$

$$\Delta R \sim \sqrt{\frac{6,6 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot c \cdot 2,8 \cdot 10^5 \text{ см}}{10^{11} \text{ эВ}} \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}} \approx 445 \text{ \AA}.$$

Такие точности недоступны (пока) современной технике ускорителей заряженных частиц, поэтому в данном случае квантово-механические ограничения не сказываются заметно на возможностях постановки эксперимента.

В 2000 г. LEP закончил свою работу и ему на смену в том же туннеле сооружается большой адронный коллайдер (Large Hadron Collider – LHC), в котором протоны будут ускоряться до энергии 7 ТэВ. Для этой энергии оценки (5.6), (5.7) дадут, соответственно, $\Delta p \cdot c \approx 22,5 \text{ эВ}$ и $\Delta R \approx 53 \text{ \AA}$.

Задача 5.2. Оценить размер атома водорода, пользуясь соотношениями неопределенностей, т.е. считая, что электрон в основном состоянии "размазан" по сферическому слою, концентрическому с ядром и имеющему толщину $\Delta r \sim R_{\text{atom}}$ (см. подробнее 13.3).

Из условия стационарности орбиты электрона в атоме Бора (см. (2.2), $\dot{r} = 0$)

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$$

находим

$$p^2 r = me^2.$$

Подставив сюда $p = \Delta p = \frac{\hbar}{\Delta r} \sim \frac{\hbar}{R_{\text{atom}}}$ и $r \approx R_{\text{atom}}$, получим

$$R_{\text{atom}} \sim \frac{\hbar^2}{me^2} \equiv R_{\text{Bohr}}.$$

Задача 5.3. Оценить ширину уровня метастабильного состояния $2S_{1/2}$ атома водорода, время жизни которого $1/7$ с (см. § 17.1).

$$\Delta \epsilon \sim \frac{\hbar}{\tau} \approx 4 \cdot 10^{-15} \text{ эВ}.$$

Задача 5.4. Переносчиком сильного взаимодействия нуклонов в ядре являются пи-мезоны, масса которых 139,57 МэВ/ c^2 . Оценить характерный радиус действия ядерных сил.

Можно представить себе простейшую модель взаимодействия двух нуклонов, "перебрасывающихся" пи-мезонами. Такие пи-мезоны могут возникать "виртуально" на время Δt , не нарушающее соотношение неопределенностей (5.4):

$$\Delta t < \frac{\hbar}{m_{\pi} c^2},$$

а скорость передачи взаимодействия ("перевос") не должна превосходить скорость света. Отсюда радиус действия ядерных сил

$$\lambda_{\text{мел}} \leq c \cdot \Delta t \leq \frac{\hbar}{m_{\pi} c} \quad (5.8)$$

Подставив сюда массу пи-мезона, найдём

$$\lambda_{\text{мел}} \leq \frac{6,58 \cdot 10^{-16}}{139,57 \cdot 10^6} \cdot 3 \cdot 10^{10} \approx 1,4 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Примерно так рассуждал японский физик Х. Юкава (*H. Yukawa*), предсказавший в 1935 г. существование частиц – переносчиков ядерного взаимодействия.

К тому времени экспериментальная ядерная физика, основоположником которой по праву считается Э. Резерфорд (§ 1.3), сделала большие успехи. В 1932 г. в Англии на одном из первых электростатических ускорителей Дж. Чедвик (*J. Chadwick*) открыл нейтрон, и вскоре В. Гейзенберг и Д. Иваненко независимо сформулировали гипотезу о составе атомного ядра из протонов и нейтронов. Размер ядра в то время был уже хорошо известен. Поэтому, записав выражение, известное теперь под названием "потенциал Юкавы",

$$\varphi(r) = \frac{C}{r} \cdot e^{-r/\lambda},$$

где C – константа, Х. Юкава из соотношения (5.8) нашёл массу частицы – переносчика ядерного взаимодействия. Год спустя К. Андерсен и С. Неддермеер обнаружили в космических лучах частицу с массой около 105 МэВ, что было воспринято как триумфальное подтверждение гипотезы Юкавы. Вскоре, правда, выяснилось, что эта частица ("мезотрон", как её тогда называли) слишком легко проникает сквозь вещество. Триумф пришлось отложить ещё на 11 лет, когда С. Пауэлл (*S. Powell*) с сотрудниками открыли, также в космических лучах, "частицу Юкавы" – пи-мезон. Сегодня мы знаем, что пи-мезоны – сильно (ядерно) взаимодействующие частицы, состоящие из u - и d -кварков, а "мезотрон" – относится к лептонам – это тяжёлый электрон, т.е. точечная массивная частица с зарядом электрона. Её современное название *мюон*.

ГЛАВА 6. ВОЛНОВАЯ МЕХАНИКА.

УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

§ 6.1. Волновое уравнение и уравнение Шрёдингера

Итак, согласно гипотезе де Бройля, движению любого материального объекта может быть сопоставлен некоторый волновой процесс. Для частицы в свободном пространстве этот волновой процесс описывается волной де Бройля (4.5). Чтобы описать движение микрочастицы в поле некоторой внешней силы, необходимо знать закон движения волны, аналогичный законам Ньютона в классической механике. Математическая запись этого закона должна устанавливать связь между волновой функцией частицы и характеристиками внешнего силового поля. Можно попытаться "сконструировать" искомый аналог уравнения движения для нерелятивистской частицы, предполагая, что для квантово-механических объектов так же, как и для классических, должны выполняться основные законы сохранения, следующие из однородности пространства-времени.

В классической электродинамике уравнение для вектора-потенциала $\vec{A}(t)$ свободной электромагнитной волны имеет вид

$$\Delta \vec{A} - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0, \quad (6.1)$$

где

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (6.2)$$

– оператор Лапласа, или *лапласиан*. Решение этого уравнения есть

$$\vec{A} = \vec{A}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)},$$

где \vec{A}_0 – константа. Подставим в это уравнения вместо \vec{A} волновую функцию (4.5)

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t)/\hbar}, \quad A = \text{const.} \quad (6.3)$$

Учтем, что

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} &= i \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial(\vec{p}\vec{r})}{\partial x_\alpha} \cdot \psi = i \frac{p_\alpha}{\hbar} \cdot \psi, \quad \alpha = 1, 2, 3, \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_\alpha^2} &= i \frac{p_\alpha}{\hbar} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} = -\frac{p_\alpha^2}{\hbar^2} \cdot \psi.\end{aligned}\quad (6.4)$$

Отсюда

$$\Delta \psi = -\sum_{\alpha=1}^3 p_\alpha^2 \cdot \frac{1}{\hbar^2} \cdot \psi = -p^2 \psi / \hbar^2.$$

Аналогично

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i\varepsilon}{\hbar} \cdot \psi, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \cdot \psi.\quad (6.5)$$

Тогда из уравнения (6.1) для ψ имеем

$$p^2 = \frac{\varepsilon^2}{c^2}.\quad (6.6)$$

Получили, что называется, "ни то ни сё". Для релятивистской частицы должно было получиться

$$p^2 c^2 + m^2 c^4 = \varepsilon_{\text{total}}^2,\quad (6.7)$$

для нерелятивистской

$$\varepsilon_{\text{total}} = \frac{p^2}{2m} + mc^2 \equiv \varepsilon + mc^2.\quad (6.8)$$

Конечно, (6.6) совпадает с (6.7) при $m=0$, т.е. для фотона. Но мы ищем уравнение для *нерелятивистской частицы* ненулевой массы. Единственный способ получить из (6.1) энергию в первой степени – понизить порядок производной по времени. Кроме того, введем некий, неизвестный пока, коэффициент α , позволяющий получить правильное соотношение для энергии-импульса из уравнения для $\psi(\vec{r}, t)$. Запишем

$$\Delta \psi - \alpha \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0.$$

Подставив сюда (6.3), найдем

$$-\frac{p^2}{\hbar^2} + \alpha \cdot \frac{i\varepsilon}{\hbar} = 0.$$

Чтобы получить $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$, следует положить

$$\alpha = -i \frac{2m}{\hbar},$$

т.е. уравнение нужно записать в виде

$$\Delta \psi + i \frac{2m}{\hbar} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0.\quad (6.9)$$

Но можно продвинуться дальше, используя соотношения (6.4), (6.5). Действительно, мы получили в (6.4)

$$p_\alpha \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha}, \quad \text{или} \quad \vec{p}\psi = -i\hbar \nabla \psi,\quad (6.10)$$

где ∇ – оператор градиента, а также

$$\varepsilon = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.\quad (6.11)$$

Поэтому уравнение (6.9) "логично" переписать в более осмысленной физической форме:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \psi.\quad (6.12)$$

Это уравнение дает при подстановке в него $\psi(\vec{r}, t)$ свободной частицы-волны (6.3) правильное равенство $\varepsilon = p^2/2m$.

Нетрудно теперь "домыслить", что следует сделать для описания движения частицы в поле некоторой силы

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\nabla U(\vec{r}).\quad (6.13)$$

Поскольку в таком *потенциальном поле* сохраняется сумма кинетической и потенциальной энергий частицы

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}),\quad (6.14)$$

то, подставив сюда (6.10) и (6.11), получим

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(\vec{r}, t) \cdot \psi. \quad (6.15)$$

Это так называемое *уравнение Шрёдингера* (E. Schrödinger, 1926 г.).

Отметим несколько моментов, ускользающих при невнимательном рассмотрении изложенного здесь "вывода" уравнения. Прежде всего, это отнюдь не вывод в строго математическом смысле, а, скорее, цепочка логических рассуждений, позволяющих *догадаться*, как должно выглядеть "правильное" уравнение. И главное здесь – некая логически оправданная форма записи, приводящая к равенству (6.14) для энергии.

Далее. Мы начали с потенциального поля (6.13), а в окончательном уравнении записали потенциал, зависящий от времени, $-U(\vec{r}, t)$, в поле которого энергия ϵ может изменяться. Эта замена – также своего рода постулат, как и всё уравнение – "догадка".

Следующий момент – энергия ϵ в уравнении Шрёдингера. Как уже сказано, это *сумма* кинетической и потенциальной энергий частицы, иногда её также называют *полной*, как и релятивистскую полную энергию (6.7). Во избежание путаницы будем в соответствующих местах специально оговаривать, с какой энергией мы имеем дело.

И последнее. Уравнение (6.15) описывает поведение ψ -функции в поле $U(\vec{r}, t)$. Но что означает эта функция (что это за "волна"?), мы пока не знаем. Не знал об этом и сам Шрёдингер на момент публикации своего уравнения. (Он склонялся к интерпретации ψ -функции как волны плотности вещества, однако, как показано в гл. 4, основная трудность такого подхода – это расплывание волнового пакета.) Почему же тогда формулировка этого уравнения явилась революционным прорывом в понимании процессов, происходящих в микромире? Дело в том, что, независимо от физической природы волновой функции, форма уравнения Шрёдингера, записанного в сферических координатах, допускает разделение переменных и автоматически ведет к закону квантования момента импульса частицы в центральном поле (детально это описано в гл. 10). Правило

квантования орбит (2.3), постулированное Бором, обрело в уравнении Шрёдингера четкую математическую формулировку.

§ 6.2. Волновая функция – "волна вероятности"

Первым ответ на вопрос "что означает волновая функция (или *пси-функция*, как её еще принято называть)?" дал Макс Борн (M. Born, 1926 г.), предложивший ее *вероятностную интерпретацию*.

Вероятность обнаружить частицу, описываемую волновой функцией $\psi(\vec{r}, t)$, в точке \vec{r} в момент t есть

$$dP(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \cdot dV \cdot dt. \quad (6.16)$$

Нормируя, как принято, вероятность на единицу, запишем *условие нормировки*:

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 \cdot dV = 1. \quad (6.17)$$

Физический смысл этого равенства очевиден: если частица "где-то есть", то вероятность её обнаружить внутри всего объема, в котором она присутствует, равна единице.

Первым "намёком" на вероятностный характер волны де Бройля является опыт Дэвиссона–Джермера: дифракционная картина есть распределение интенсивности волны, т.е. $|\psi(\vec{r})|^2$, а тогда эту картину можно интерпретировать как распределение вероятности попадания электрона в ту или иную точку пространства.

В этом опыте поток электронов был интенсивным, так что в "дифракционные отверстия" (т.е. в межплоскостное пространство кристалла) попадало одновременно несколько электронов, что допускало неоднозначное толкование результата. В более позднем опыте Л.М. Бибермана, Н.Г. Сушкина и В.А. Фабриканта (1949 г.) электроны проходили сквозь дифракционное устройство по одиночке. Поэтому наблюдавшаяся в этом опыте дифракционная картина подтверждает вероятностный характер рассеяния электрона на кристалле.

Задача 6.1. Толщина кристалла, на котором рассеиваются электроны, равна 1 мм. Оценить, при каком токе электронного пучка рассеяние электронов происходит "поодиночке", если их энергия 100 эВ.

$$\text{Скорость электронов } v = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{mc^2}} \cdot c = \sqrt{\frac{2 \cdot 100 \text{ эВ}}{0,5 \cdot 10^6 \text{ эВ}}} \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с} = 6 \cdot 10^8 \text{ см/с.}$$

Расстояние между электронами должно быть больше 1 мм, значит линейная плотность электронов в пучке $dN/dS \leq 10 \text{ см}^{-1}$. Таким образом,

$$I = ev \cdot S = ev \cdot \frac{dN}{dS} < 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 6 \cdot 10^8 \cdot 10 \approx 1 \text{ нА.}$$

Величину

$$\frac{dP}{dV} = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (6.18)$$

называют плотностью вероятности. Её физический смысл тот же, что и функции распределения в статистической физике.

Из условия нормировки (6.17) видно, что ψ -функция определена здесь с точностью до произвольного фазового множителя $e^{i\varphi}$, где φ — любая действительная величина (в этом случае $|e^{i\varphi}| = 1$).

В соответствии с этим подходом меняется и смысл волны де Бройля — для одиночной частицы это "волна вероятности". Тогда и волновой пакет, рассмотренный в § 4.5, является такой волной вероятности. Его "расплывание" при движении частицы в свободном пространстве означает, что вероятность найти её в точке $x_0 = v_0 t$ всегда максимальна, но убывает со временем, — частица может быть обнаружена, с конечной вероятностью, и в других точках пространства. В этом — особенность частицы как квантово-физического объекта.

Задача 6.2. Найти значение амплитуды A волнового пакета (4.18).

Из условия нормировки (6.17) с учетом значения интеграла (4.21) имеем

$$1 = |A|^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/\Delta^2} dx = |A|^2 \cdot \Delta^2 \cdot \sqrt{\pi}.$$

Отсюда

$$A = \frac{1}{\Delta^{1/2} \cdot \pi^{1/4}} \cdot e^{i\alpha}, \quad (6.19)$$

где α — фаза, произвольное действительное число.

Отметим, что привлекательная, на первый взгляд, попытка заменить гауссово распределение в волновом пакете (4.17) на δ -функцию ("точечная частица") встречает, к сожалению, непреодолимые трудности при нормировке. Действительно, выбрав ψ -функцию в виде

$$\psi(x, t) = A \cdot \delta(x) \cdot e^{i(p_0 x - \varepsilon_0 t)/\hbar},$$

мы получим из (6.17)

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = |A|^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} (\delta(x))^2 dx = |A|^2 \cdot \delta(0),$$

$$|A| = \frac{1}{\sqrt{\delta(0)}},$$

что равняется формально $1/\sqrt{\infty}$. Использовать такую величину, подразумевая каждый раз какие-то предельные переходы, очень неудобно.

Задача 6.3. Частица движется между стенками ящика. Считая отражения от стенок абсолютно упругими, найти вероятность обнаружить частицу в точке x в момент t (ограничиться случаем одномерного движения).

Это случай так называемой бесконечно высокой потенциальной ямы

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

где a — ширина ямы. В этом случае уравнение Шрёдингера (6.15) имеет вид

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}.$$

Его решение будем искать в форме волны де Бройля (4.5). После подстановки получим достаточно очевидный результат:

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}, \quad p = \pm \sqrt{2m\varepsilon} \equiv \pm p_0,$$

$\varepsilon \equiv \varepsilon_0$ — известная нам энергия частицы. Это означает, что решение содержит две волны

$$\psi(x, t) = A e^{i(p_0 x - \varepsilon_0 t)/\hbar} + B e^{-i(p_0 x + \varepsilon_0 t)/\hbar},$$

первая из которых распространяется в положительном направлении оси x ($\dot{x} = \epsilon_0/p_0$), вторая – в обратном ($\dot{x} = -\epsilon_0/p_0$).

Потребовав, чтобы решение удовлетворяло граничным условиям (см. подробнее § 7.1, формулы (7.15))

$$\psi(0, t) = \psi(a, t) = 0, \quad (6.20)$$

найдем

$$\begin{aligned} A + B &= 0, \\ Ae^{ip_0a/\hbar} + Be^{-ip_0a/\hbar} &= 0. \end{aligned}$$

Отсюда

$$A = -B, \quad \sin \frac{p_0 a}{\hbar} = 0.$$

Соответственно, волновая функция принимает вид

$$\psi(x, t) = 2iA \sin \frac{p_0 x}{\hbar} \cdot e^{-iEt}, \quad (6.21)$$

а значения импульса должны удовлетворять равенству

$$p_0 a = n\hbar, \quad n - \text{целое}, \quad n \neq 0. \quad (6.22)$$

Амплитуду A найдем из условия нормировки (6.17) с учетом (6.21):

$$1 = 4|A|^2 \cdot \int_0^a \sin^2 \frac{p_0 x}{\hbar} \cdot dx = 2 \cdot |A|^2 \cdot a.$$

Окончательно найдём

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin \frac{m\pi x}{a} \cdot e^{-i(\epsilon_1 + \alpha)\hbar}, \quad (6.23)$$

где α – неопределенный фазовый множитель. Отсюда следует, что вероятность обнаружить частицу в интервале (x, dx) равна

$$dP(x) = \left(1 - \cos 2\pi n \cdot \frac{x}{a}\right) \cdot \frac{dx}{a}. \quad (6.24)$$

Полученный результат удивителен с точки зрения классической механики, где частица, "болтающаяся" между стенками ящика со скоростью v_0 , может быть обнаружена в любой точке своей траектории с равной вероятностью, если привязка её координаты по времени заранее не известна: в интервале (x, dx) частица пребывает в течение одного и того же момента времени

$dt = dx/v_0$. В квантовой механике этот интервал зависит от x согласно (6.24):

$$\frac{dt}{T/2} = dP(x).$$

Согласно принципу соответствия при $\hbar \rightarrow 0$ мы должны из (6.24) получить классический результат (точнее, тот же результат, что следует из классической механики). Действительно, для

заданных p_0 и a переход $\hbar \rightarrow 0$ означает, согласно (6.22), что $n \rightarrow \infty$, т.е. период косинуса в (6.24) становится очень коротким:

$$\delta x = \frac{a}{n} \rightarrow 0.$$

Поэтому вероятность (6.24) обнаружить частицу внутри интервала $dx \gg \delta x$ в среднем по интервалу равна dx/a , в полном соответствии с ожиданиями классической механики:

$$\overline{dP}^{dx} = \overline{\left(1 - \cos 2\pi \frac{x}{\delta x}\right)^{dx}} \cdot \frac{dx}{a} \xrightarrow{\delta x \rightarrow 0} \frac{dx}{a}.$$

Аналогично обстоит дело с дискретностью значений импульса (6.22). Это условие означает, что в ящик шириной a "влезает" целое число полуволен де Бройля:

$$a = n \frac{\pi \hbar}{p_0} = n \frac{\lambda_D}{2}.$$

При $\hbar \rightarrow 0$ ($\lambda_D \rightarrow 0$) имеем $n \rightarrow \infty$, и условие дискретности "размывается": для любых p_0 и a найдется такое $n \gg 1$, что условие (6.22) будет удовлетворено.

§ 6.3. Принцип суперпозиции состояний

В электродинамике известен принцип суперпозиции электромагнитных полей зарядов и токов – это *экспериментальный факт*, следствием которого является линейность уравнений Максвелла: входящие в них компоненты электромагнитного поля $\vec{E}, \vec{D}, \vec{B}, \vec{H}$, плотности заряда ρ и тока \vec{j} присутствуют в первой степени.

Аналогичный принцип суперпозиции действует и в квантовой механике. И поскольку "роль" поля (вектора-потенциала в волновом уравнении), как мы видели, играет волновая функция $\psi(\vec{r}, t)$, то можно сформулировать принцип суперпозиции.

Пусть квантовая система (частица, совокупность частиц) может находиться в N различных состояниях, каждое из которых описывается своей волновой функцией ψ_n . Тогда эта система может быть обнаружена и в состоянии, которое описывается функцией ψ , представляющей собой линейную комбинацию волновых функций ψ_n :

$$\psi(\vec{r}_i, t) = \sum_{n=1}^N C_n \psi_n(\vec{r}_i, t), \quad (6.25)$$

где \vec{r}_i – радиус-вектор i -й частицы, входящей в систему из N_{particle} частиц, $i = 1, 2, \dots, N_{\text{particle}}$. Коэффициенты C_n , вообще говоря, комплексные числа. Их называют амплитудами состояний ψ_n . Соответственно, вероятность обнаружить систему в одном из N состояний в момент t есть

$$dP_n = \int |C_n \psi_n|^2 \cdot dV, \quad (6.26)$$

где dV – элемент объема в окрестностях точек \vec{r}_n , один и тот же по величине для каждой точки.

Примером физической системы может служить атом Бора (§ 2.2): как мы видели, каждому радиусу r_n (2.4) соответствует одно из возможных состояний атома водорода.

Условие нормировки ψ_N то же, что и для ψ -функции простой системы:

$$\int_V |\psi_N|^2 dV = 1. \quad (6.27)$$

Подставив сюда (6.25), найдем

$$1 = \int_V |\psi_N|^2 dV = \sum_{n=1}^N \int |C_n \psi_n|^2 dV + \sum_{m \neq n=1}^N \int C_n C_m^* \psi_m \psi_n^* dV, \quad (6.28)$$

где индекс "*" обозначает комплексно-сопряженную величину. Как мы увидим ниже (§ 8.4), в системе, состоящей из независимых состояний, интегралы от перекрестных членов $\psi_m \psi_n^*$ равны нулю. Это, как мы узнаем дальше, так называемое условие ортогональности волновых функций (см. (8.18) ниже). Поэтому в условии нормировки (6.28) остается только первая сумма:

$$\sum_{n=1}^N |C_n|^2 \int |\psi_n|^2 \cdot dV = 1.$$

Волновые функции возможных состояний удобно также нормировать на единицу:

$$\int |\psi_n|^2 dV = 1.$$

В результате условие нормировки волновой функции системы принимает вид

$$\sum_n P_n = 1, \quad \text{где } P_n = |C_n|^2 \quad (6.29)$$

– вероятность обнаружить систему в состоянии n . Другим примером представления ψ -функции системы в виде суперпозиции состояний является волновой пакет (§§ 4.3 – 4.5): мы представили его ψ -функции в виде разложения в интеграл Фурье по монохроматическим (моноэнергетическим) волнам (4.19). Это типичный случай набора состояний – в данном случае отличающихся значением импульса-энергии.

ГЛАВА 7. ПРИМЕНЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

§ 7.1. Плотность потока вероятности

В гидродинамике, газодинамике, электродинамике известны и широко используются так называемые *уравнения непрерывности*. Они отражают экспериментальный факт сохранения массы (гидро- и газодинамика) или заряда (электродинамика). Физический смысл этих уравнений достаточно прост: изменение массы (заряда) внутри некоторого заданного объема равно потоку массы (заряда) через поверхность, ограничивающую этот объем (рис. 7.1).

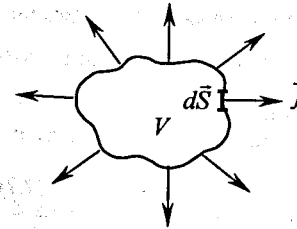


Рис. 7.1. Поток вещества из объема V

Соответственно, уравнение, описывающее этот закон сохранения, имеет вид

$$-\frac{dQ}{dt} = I, \quad (7.1)$$

где Q – масса (заряд), содержащаяся в объеме V , I – поток (ток) вещества (заряда) через граничную поверхность. Знаки выбраны так, что поток считается положительным, если вещество (заряд) вытекает из объема, т.е. масса (заряд) убывает. Очевидно

$$Q = \int_V \rho \cdot dV, \quad I = \oint_S (\vec{j}, d\vec{S}), \quad (7.2)$$

где ρ – плотность вещества (заряда),

$$\vec{j} = \rho \vec{v}, \quad (7.3)$$

\vec{j} – плотность потока (тока), \vec{v} – скорость движения вещества (заряда). Подставив соотношения (7.2) в (7.1), получим уравнение непрерывности в интегральной форме:

$$-\frac{d}{dt} \int_V \rho(\vec{r}, t) \cdot dV = \oint_S (\vec{j}(\vec{r}, t), d\vec{S}). \quad (7.4)$$

Используя известное равенство (теорема Остроградского–Гаусса в математике)

$$\oint_S (\vec{j}, d\vec{S}) = \int_V \operatorname{div} \vec{j} \cdot dV, \quad (7.5)$$

получим из (7.4) уравнение непрерывности в дифференциальной форме:

$$\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (7.6)$$

Естественно поставить вопрос, как должно выглядеть уравнение непрерывности в квантовой механике? "Подсказку" найдем, вспомнив, что $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ есть плотность вероятности (см. (6.16)). Очевидно, что

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{j}_\psi, \quad (7.7)$$

где \vec{j}_ψ – плотность потока вероятности, которую еще предстоит определить. Смысл этого выражения тот же, что и уравнений непрерывности для массы или

заряда: изменение вероятности обнаружения частицы в окрестности точки \vec{r} в момент времени t равно потоку вероятности через поверхность, охватывающую эту точку.

Найти выражение для \vec{j}_ψ можно, воспользовавшись уравнением Шрёдингера (6.15). Записав его для ψ -функции, произведём затем операцию его комплексного сопряжения. Получим два уравнения:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(\vec{r}, t) \cdot \psi, \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + U(\vec{r}, t) \cdot \psi^*. \end{aligned}$$

Умножив первое уравнение на ψ^* , а второе на ψ и вычитая затем одно полученное равенство из другого, найдем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi). \quad (7.8)$$

Чтобы придать этому равенству вид уравнения непрерывности (7.7), преобразуем скобку в правой части, используя равенство

$$\psi \cdot \Delta \psi^* - \psi^* \cdot \Delta \psi \equiv \nabla (\psi \cdot \nabla \psi^* - \psi^* \cdot \nabla \psi). \quad (7.9)$$

В его справедливости легко убедиться, продифференцировав правую часть. Теперь уравнению (7.8) можно придать вид

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} (\psi \cdot \nabla \psi^* - \psi^* \cdot \nabla \psi). \quad (7.10)$$

Таким образом, величина

$$\vec{j}_\psi = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \cdot \nabla \psi^* - \psi^* \cdot \nabla \psi) \quad (7.11)$$

и есть плотность потока вероятности.

Задача 7.1. Найти плотность потока вероятности для монохроматической волны де Бройля (4.5).

Подставив $\psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar}$ в (7.11), найдем

$$\vec{j}_\psi = \frac{\vec{p}}{m} |A|^2 = \vec{v}_0 \cdot |A|^2.$$

Учитывая, что $|A|^2$ — плотность вероятности, получаем, что вероятность обнаружить частицу "движется" со скоростью \vec{v}_0 .

Нетрудно убедиться, что волна

$$\psi^{(-)}(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-i(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t/\hbar)}$$

даст поток плотности вероятности в обратном направлении:

$$\vec{j}_\psi^{(-)} = -\vec{v}_0 |A|^2.$$

О неопределенности амплитуды A мы уже говорили в начале § 4.4.

Задача 7.2. Найти плотность потока вероятности для волнового пакета (4.27).

Аналогично предыдущей задаче с учетом нормировки (6.19) найдем

$$j_\psi(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \cdot \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{v_0}{\sqrt{\pi} \cdot \Delta(t)} \cdot e^{-(x-v_0 t)^2 / \Delta^2(t)}.$$

В правой части скорость $v_0 > 0$, т.е. поток вероятности направлен в положительном направлении оси x .

Если потенциал $U(\vec{r})$ в уравнении Шрёдингера не зависит от времени, то можно искать решение в виде

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\epsilon t/\hbar}. \quad (7.12)$$

Подставив это решение в (6.15) и сократив на экспоненту, найдём уравнение для $\psi(\vec{r})$:

$$\Delta \psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} [U(\vec{r}) - \epsilon] \cdot \psi(\vec{r}). \quad (7.13)$$

Подчеркнем достаточно общий характер этого уравнения: оно справедливо для любого $U(\vec{r})$, не зависящего от времени. Это так называемое *стационарное уравнение Шрёдингера* (чтобы не возникало путаницы при ссылке на уравнение Шрёдингера, уравнение (6.15) в отличие от (7.13) называют *временным уравнением Шрёдингера*). В случае одномерного потенциала $U(x)$ уравнение имеет вид

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot [U(x) - \epsilon] \cdot \psi(x). \quad (7.14)$$

Сформулируем условия поведения ψ -функции на границе двух областей, или, как их принято называть, *граничные условия*. Таких условий два, и в одномерном случае они имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0), \\ \frac{d\psi_1}{dx} \Big|_{x=0} &= \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=0}, \end{aligned} \quad (7.15)$$

т.е. ψ -функция и её производная непрерывны на границе раздела двух областей. Первое условие следует из очевидных физических соображений: вероятность обнаружить частицу на границе раздела областей не зависит от направления подхода к этой границе — из области 1 или из области 2.

Второе условие (7.15) следует из уравнения непрерывности (7.10) в случае стационарной задачи ($\partial/\partial t = 0$). Действительно, записав

$$\operatorname{div} \vec{j}_\psi = 0,$$

имеем в одномерном случае

$$\frac{dj_\psi(x)}{dx} = 0, \quad \text{или} \quad j_{\psi_1}(0) = j_{\psi_2}(0).$$

Подставив сюда значение j_ψ из (7.11), получим

$$\psi_1(0) \cdot \frac{\partial \psi_1^*}{\partial x} \Big|_{x=0} - \psi_1^*(0) \cdot \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \Big|_{x=0} = \psi_2(0) \cdot \frac{\partial \psi_2^*}{\partial x} \Big|_{x=0} - \psi_2^*(0) \cdot \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \Big|_{x=0}.$$

С учетом первого из равенств (7.15) находим отсюда и второе.

Условия (7.15) иногда называют "стандартными требованиями" к волновой функции, и в наиболее общем случае они формулируются так: волновая функция должна быть однозначна, конечна, непрерывна и иметь непрерывную первую производную во всей области своего определения.

Задача 7.3. Найти коэффициенты отражения и прохождения потока монохроматических частиц с энергией ϵ , падающих на границу "скачка потенциала" (рис. 7.2).

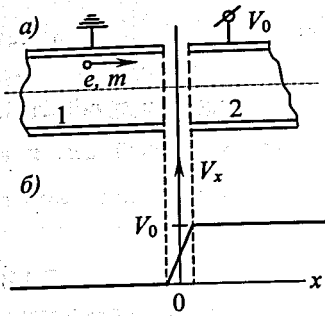


Рис. 7.2. Движение частиц внутри трубок дрейфа, разделенных сетками (а), и распределение потенциала вдоль оси трубок (б)

Потенциальная энергия частицы при переходе из левой трубки в правую изменяется от нуля (левая трубка "заземлена") до $U = eV_0$, где V_0 – потенциал правой трубки. Можно считать переходную область очень короткой и "сшивать" решения для трубок 1 и 2. Будем искать решение уравнения Шрёдингера (6.15) для потенциальной энергии

$$U(x) = U = \text{const}, \quad U = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0 \equiv eV_0, & x > 0 \end{cases}$$

в виде

$$\psi_{1,2}(x, t) = A_{1,2} \cdot \psi_{1,2}(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

В рассматриваемой задаче $U(x) = \text{const}$ (нуль или U_0). Поэтому решение ищем в виде

$$\psi(x) = A \cdot e^{kx}$$

Подстановка в (7.13) дает характеристическое уравнение для $\kappa(x)$:

$$\kappa(x) = \pm \sqrt{2m[U(x) - \epsilon]}/\hbar$$

Возможны 2 случая: $\epsilon > U_0$ и $\epsilon < U_0$. Начнем с первого.

а) $\epsilon > U_0$.

В этом случае κ – мнимая величина при любом x . Введем обозначение

$$\kappa(x) = \pm ik = \pm i\sqrt{2m(\epsilon - U(x))}/\hbar \quad (7.16)$$

Соответственно, решение в областях (трубках) 1 и 2 имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 \cdot e^{ik_0x} + B_1 \cdot e^{-ik_0x}, & k_0 &= \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar}, \\ \psi_2(x) &= A_2 \cdot e^{ikx} + B_2 \cdot e^{-ikx}, & k &= \frac{\sqrt{2m(\epsilon - V_0)}}{\hbar}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Оба параметра k_0 и k – действительные величины. Коэффициенты $A_{1,2}$ и $B_{1,2}$ находим, используя условия на ψ -функцию на границе раздела 1 и 2.

Подставив решение $\psi_{1,2}(x)$ из (7.17) в (7.15), найдем

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ A_1 - B_1 &= \frac{k}{k_0}(A_2 - B_2). \end{aligned}$$

Нам не хватает еще двух уравнений, чтобы найти все коэффициенты A и B . Одно из недостающих уравнений заменяет условие, которое следует из физического смысла задачи: в трубке 2 частицы движутся только в одном направлении – вправо, т.к. нет никаких "причин" для существования встречного потока. Поэтому (см. задачу 7.1) коэффициент B_2 – амплитуду встречной волны в трубке 2 – следует положить равным нулю. Далее выразим коэффициенты B_1 и A_2 через A_1 (опустив для краткости индекс 1):

$$A_2 = \frac{2k_0}{k_0 + k} \cdot A, \quad B_1 = \frac{k_0 - k}{k_0 + k} \cdot A.$$

Соответственно,

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A \left(e^{ik_0x} + \frac{k_0 - k}{k_0 + k} e^{-ik_0x} \right), \\ \psi_2(x) &= A \cdot \frac{2k_0}{k_0 + k} e^{ikx}. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что в области 1 существует два потока (см. задачи 7.1, 7.2):

$$j_{\psi_1}^{(+)} = |A|^2 \cdot \frac{k_0 \hbar}{m}, \quad j_{\psi_1}^{(-)} = -|A|^2 \cdot \left(\frac{k_0 - k}{k_0 + k} \right)^2 \cdot \frac{k_0 \hbar}{m},$$

а в области 2 только один:

$$j_{\psi_2}^{(+)} = |A|^2 \cdot \left(\frac{2k_0}{k_0 + k} \right)^2 \cdot \frac{k \hbar}{m}.$$

Нетрудно видеть, что при переходе из области 1 в область 2 полный поток сохраняется:

$$j_{\psi_1}^{(+)} + j_{\psi_1}^{(-)} = j_{\psi_2}^{(+)}.$$

Знак "минус" в выражении для $j_{\psi_1}^{(-)}$ означает, что этот поток направлен против оси x , навстречу падающему потоку $j_{\psi_1}^{(+)}$, т.е. является отраженным потоком. Поток $j_{\psi_2}^{(+)}$ – проходящий.

Коэффициенты отражения и прохождения, соответственно, равны

$$\begin{aligned} \sigma_r &= \frac{|j_{\psi_1}^{(-)}|}{j_{\psi_1}^{(+)}} = \left(\frac{k_0 - k}{k_0 + k} \right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1-u}}{1 + \sqrt{1-u}} \right)^2, \\ \sigma_t &= \frac{j_{\psi_2}^{(+)}}{j_{\psi_1}^{(+)}} = \frac{4k_0 k}{(k_0 + k)^2} = \frac{4\sqrt{1-u}}{(1 + \sqrt{1-u})^2}, \\ u &= \frac{U_0}{\epsilon} < 1, \quad \sigma_r + \sigma_t = 1. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Отметим, что отражение становится заметным при $\varepsilon \approx U_0$ ($u \approx 1$) и при этом падает коэффициент прохождения (рис. 7.3). Коэффициенты σ_r и σ_t сравниваются при

$$u = u^* = 0,9705, \quad \sigma_r(u^*) = \sigma_t(u^*) = 0,5.$$

Наконец, частицы полностью отражаются ($\sigma_r = 0$, $\sigma_t = 1$) при $\varepsilon = U_0$ ($u = 1$). Этот результат совпадает с классическим – частица не может проникнуть в область, где её кинетическая энергия полностью перешла в потенциальную. Тем не менее возникает вопрос о природе отражённого потока при $\varepsilon > U_0$. Это чисто квантовое явление, не наблюдаемое в классической механике. Мы вернёмся к этому вопросу в следующем параграфе.

б) $\varepsilon < U_0$.

Теперь κ – мнимая величина в области 1 и действительная в области 2:

$$\kappa(x) = \begin{cases} \pm ik_0, & x < 0, \\ \pm \kappa = \pm \frac{\sqrt{2m(U_0 - \varepsilon)}}{\hbar}, & x > 0. \end{cases} \quad (7.19)$$

Параметр k_0 определен в (7.17). Соответственно, вместо решения (7.16) имеем

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 \cdot e^{ik_0x} + B_1 \cdot e^{-ik_0x}, \\ \psi_2(x) &= A_2 \cdot e^{\kappa x} + B_2 \cdot e^{-\kappa x}. \end{aligned} \quad (7.20)$$

Теперь нужно отбросить положительную экспоненту в выражении для $\psi_2(x)$, т.к. экспоненциальное нарастание вероятности присутствия частицы в области 2 не имеет физического смысла. Из граничных условий (7.15) найдем

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= B_2, \\ A_1 - B_1 &= -\frac{\kappa}{ik_0} \cdot B_2. \end{aligned}$$

Отсюда

$$B_2 = \frac{2k_0}{k_0 + i\kappa} \cdot A, \quad B_1 = \frac{k_0 - i\kappa}{k_0 + i\kappa} \cdot A.$$

Таким образом, коэффициенты A_1 , B_1 , B_2 получаются из коэффициентов предыдущего случая заменой

$$k \rightarrow i\kappa.$$

Решение (7.20) можно записать в окончательном виде

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A \cdot \left(e^{ik_0x} + \frac{k_0 - i\kappa}{k_0 + i\kappa} \cdot e^{-ik_0x} \right), \\ \psi_2(x) &= A \cdot \frac{2k_0}{k_0 + i\kappa} \cdot e^{-\kappa x}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Потоки вероятности существуют только в области 1, причем прямой и обратный потоки равны по абсолютной величине:

$$j_{\psi_1}^{(+)} = |A|^2 \cdot \frac{k_0 \hbar}{m} = -j_{\psi_1}^{(-)}, \quad j_{\psi_2} = 0.$$

Читателю, несомненно, доставит удовольствие самостоятельно получить значения вероятности обнаружить частицу в областях 1 и 2:

$$\begin{aligned} |\psi_1(x)|^2 &= 2|A|^2 \cdot [1 + \cos(2k_0x - \alpha)], \\ \operatorname{tg} \alpha &= \frac{2k_0\kappa}{k_0^2 - \kappa^2} = \frac{2\sqrt{u-1}}{2-u}, \end{aligned} \quad (7.22)$$

$$|\psi_2(x)|^2 = 4|A|^2 \cdot \frac{k_0^2}{k_0^2 + \kappa^2} \cdot e^{-2\kappa x} = 4|A|^2 \cdot \frac{1}{u} \cdot e^{-2\kappa x}, \quad u = \frac{U_0}{\varepsilon} \geq 1.$$

Частицы проникают в область 2 на глубину $x \sim 1/(2\kappa)$ (рис. 7.4). Значение вероятности обнаружить частицу в точке на границе ($x = 0$) зависит от соотношения ε и U_0 :

$$|\psi(0)|^2 = 4|A|^2 \cdot \frac{\varepsilon}{U_0} \leq 4|A|^2. \quad (7.23)$$

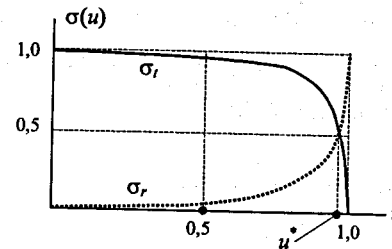


Рис. 7.3. Зависимости $\sigma_t(u)$ и $\sigma_r(u)$ при $\varepsilon > U_0$ (7.18); $u^* = 0,9705$

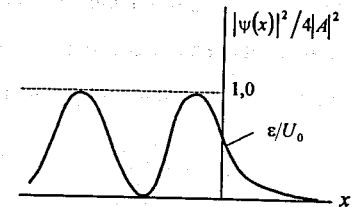


Рис. 7.4. Зависимость $|\psi(x)|^2$ для случая $\varepsilon < U_0$ (7.22)

§ 7.2. Прохождение потенциального барьера. Туннельный эффект

Если область ненулевого потенциала имеет ограниченную протяженность вдоль оси x , то следует искать решение уравнения Шрёдингера в трёх областях, две из которых имеют нулевой потенциал. Подобное распределение потенциала называют потенциальным барьером (рис. 7.5). Качественно поведение функций $\psi(x)$ и $|\psi(x)|^2$ можно понять в этом случае, воспользовавшись результатами предыдущего параграфа и задачи 7.3.

В случае, когда энергия частицы превышает максимальное значение потенциальной энергии, $\epsilon > U_{\max}$, частицы преодолевают барьер, отражаясь от него с некоторой вероятностью, т.е. $\sigma_r \leq 1$, $\sigma_r \ll 1$. Если же $\epsilon < U_{\max}$, частицы проникают внутрь потенциального барьера на расстояние (см. (7.22))

$$\Delta x \sim \frac{1}{\kappa} \sim \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_{\max} - \epsilon)}} = \frac{\lambda_U}{2\pi} \equiv \lambda_U, \quad (7.24)$$

где λ_U – волна де Бройля частицы с кинетической энергией $U_{\max} - \epsilon$. Внутри барьера вероятность обнаружить частицу резко падает, но остается конечной, отличной от нуля. Поэтому и за барьером существует вероятность обнаружить частицу, т.е.

$$\psi(x) \neq 0 \text{ при } x > x_2.$$

Это означает, что коэффициент прохождения, или коэффициент прозрачности, потенциального барьера σ_t отличен от нуля. По порядку величины его значение можно оценить, воспользовавшись соотношениями (7.22):

$$\sigma_t \sim \frac{|\psi_2(a)|^2}{|\psi_1(0)|^2} \sim e^{-2\kappa \ell}, \quad \kappa = \frac{1}{\lambda_U}, \quad \ell = x_2 - x_1. \quad (7.25)$$

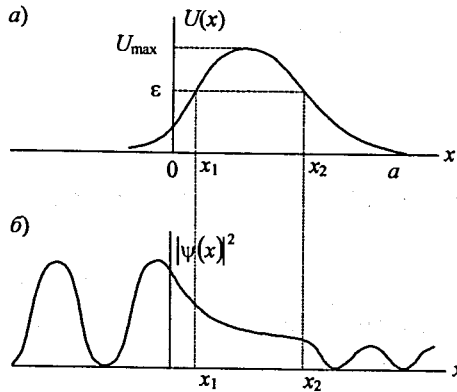


Рис. 7.5. Потенциальный барьер (а) и качественная зависимость $|\psi(x)|^2$ для случая $\epsilon < U_{\max}$ (б)

В случае потенциального барьера прямоугольной формы (рис. 7.6) возможно строгое решение (задача 7.4), дающее результат, качественно совпадающий с (7.25) при $\lambda_U \ll a$ (см. (7.33), $\kappa a \gg 1$). Более точную формулу для σ_t можно получить, воспользовавшись методом ВКБ (§ 7.3 и формула (7.50)).

Задача 7.4. Найти коэффициент отражения и прохождения частиц с энергией ϵ , падающих на "прямоугольный" потенциальный барьер (рис. 7.6):

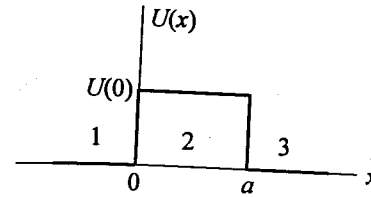


Рис. 7.6. Функция потенциальной энергии $U(x)$ (7.26) – потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & 0 < x < a, \\ 0, & a < x. \end{cases} \quad (7.26)$$

Такое распределение потенциальной энергии частицы имеет место в устройстве из трех трубок, аналогичных изображенным на рис. 7.2, две крайние из которых имеют нулевой потенциал ("заземлены"), а средняя – потенциал $V_0 = U_0/e$.

Решение уравнения Шрёдингера для каждой из трех областей определения функции $U(x)$ (7.26) запишем аналогично (7.16) и (7.20), начав со случая $\epsilon < U_0$.

а) $\epsilon < U_0$:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 \cdot e^{ik_0 x} + B_1 \cdot e^{-ik_0 x}, & x < 0, \\ \psi_2(x) &= A_2 \cdot e^{\kappa x} + B_2 \cdot e^{-\kappa x}, & 0 < x < a, \\ \psi_3(x) &= A_3 \cdot e^{ik_0 x}, & a < x, \\ k_0 &= \sqrt{2m\epsilon}/\hbar, \quad \kappa = \sqrt{2m(U_0 - \epsilon)}/\hbar. \end{aligned} \quad (7.27)$$

В решении $\psi_3(x)$ оставлена только волна, распространяющаяся в положительном направлении оси x : здесь, как и в задаче 7.3, при $x > 0$ нет препятствий, порождающих отраженную волну. В области 2 решение содержит нарастающую экспоненту, т.к. размер области ограничен и, стало быть, величина этого слагаемого также ограничена, нет оснований для его исключения, как это сделано в задаче 7.3, б.

Условия непрерывности $\psi(x)$ и её производных на границах областей 1–3 дают:

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0) \rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0) \rightarrow ik_0(A_1 - B_1) = \kappa(A_2 - B_2), \\ \psi_2(a) &= \psi_3(a) \rightarrow A_2 \cdot e^{\kappa a} + B_2 \cdot e^{-\kappa a} = A_3 \cdot e^{ik_0 a}, \\ \psi_2'(a) &= \psi_3'(a) \rightarrow \kappa(A_2 \cdot e^{\kappa a} - B_2 \cdot e^{-\kappa a}) = ik_0 A_3 \cdot e^{ik_0 a}. \end{aligned} \quad (7.28)$$

Мы получили четыре уравнения, содержащие пять амплитуд A_1, B_1, A_2, B_2, A_3 . Выразим четыре из них через амплитуду исходной (падающей) волны (сняв для краткости записи индекс 1):

$$A_1 \equiv A.$$

Вначале исключим A_3 из 3-го и 4-го уравнений (7.28). Найдем

$$B_2 = \frac{\kappa - ik_0}{\kappa + ik_0} \cdot A_2 \cdot e^{2\kappa a}. \quad (7.29)$$

Затем исключим B_1 из 1-го и 2-го уравнений, получим

$$A_2 = \frac{ik_0(\kappa + ik_0)}{(k_0^2 - \kappa^2) \cdot \text{sh}\kappa a + 2ik_0\kappa \cdot \text{ch}\kappa a} \cdot e^{-\kappa a} \cdot A.$$

Подставив этот результат в (7.29), найдем B_2 , а из первого и третьего уравнений (7.28) найдем, зная A_2 и B_2 , амплитуды B_1 и A_3 . В результате имеем

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{(k_0^2 + \kappa^2) \cdot \text{sh}\kappa a}{D_\kappa} \cdot A, \\ A_2 &= \frac{ik_0(\kappa + ik_0)}{D_\kappa} \cdot e^{-\kappa a} \cdot A, \\ B_2 &= \frac{ik_0(\kappa - ik_0)}{D_\kappa} \cdot e^{\kappa a} \cdot A, \\ A_3 &= \frac{2ik_0\kappa}{D_\kappa} \cdot e^{-ik_0 a} \cdot A, \\ D_\kappa &= (k_0^2 - \kappa^2) \cdot \text{sh}\kappa a + 2ik_0\kappa \cdot \text{ch}\kappa a. \end{aligned} \quad (7.30)$$

Вычислим теперь значения вероятностей и коэффициентов отражения/прохождения. Вычисления эти достаточно громоздки и требуют определенного терпения.

$$\begin{aligned} |\psi_1(x)|^2 &= |A|^2 + AB_1^* \cdot e^{2ik_0 x} + A^* B_1 \cdot e^{-2ik_0 x} + |B_1|^2 = 2|A|^2 \cdot \frac{(k_0^2 + \kappa^2)}{|D_\kappa|^2} \times \\ &\times \left\{ [k_0^2 + \kappa^2 + (k_0^2 - \kappa^2) \cdot \cos 2k_0 x] \cdot \text{sh}^2 \kappa a - k_0 \kappa \cdot \text{sh} 2\kappa a \cdot \sin 2k_0 x \right\} + 2k_0^2 \kappa^2, \\ |D_\kappa|^2 &= (k_0^2 + \kappa^2)^2 \cdot \text{sh}^2 \kappa a + 4k_0^2 \kappa^2; \\ \sigma_r &= \frac{|j_{\psi_1}^{(-)}|}{|j_{\psi_1}^{(+)}|} = \frac{[(k_0^2 + \kappa^2) \cdot \text{sh}\kappa a]^2}{|D_\kappa|^2}, \quad \sigma_t = \frac{|j_{\psi_3}^{(+)}|}{|j_{\psi_1}^{(+)}|} = \frac{(2k_0\kappa)^2}{|D_\kappa|^2}, \\ |\psi_2(x)|^2 &= 2 \cdot |A|^2 \cdot k_0^2 \frac{(k_0^2 + \kappa^2) \cdot \text{ch} 2\kappa(x-a) - (k_0^2 - \kappa^2)}{|D_\kappa|^2}, \\ |\psi_3(x)|^2 &= |A|^2 \cdot \frac{(2k_0\kappa)^2}{|D_\kappa|^2}. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Нетрудно убедиться, что

$$\sigma_r + \sigma_t = 1. \quad (7.32)$$

Из соотношений (7.31) видно, что параметром, характеризующим "прозрачность" барьера, является произведение κa . Асимптотики коэффициентов отражения и прохождения имеют вид

$$\begin{aligned} \kappa a \ll 1, \quad \sigma_r &\approx \left(\frac{k_0^2 + \kappa^2}{2k_0\kappa} \right)^2 \cdot (\kappa a)^2, \quad \sigma_t = 1 - \sigma_r, \\ \kappa a \gg 1, \quad \sigma_r &\approx 1 - 8 \cdot \left(\frac{k_0\kappa}{k_0^2 + \kappa^2} \right)^2 \cdot e^{-2\kappa a}, \quad \sigma_t = 1 - \sigma_r \approx 8 \frac{\varepsilon(U_0 - \varepsilon)}{U_0^2} \cdot e^{-2\kappa a}. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Таким образом, полученный результат подтверждает оценку (7.25).

Запишем, наконец, значения $|\psi_{1,2,3}(x)|^2$ при больших κa ("слабопрозрачный" барьер):

$$\begin{aligned} \kappa a \gg 1, \quad |D_\kappa|^2 &\approx \frac{k_0^2 + \kappa^2}{4} \cdot e^{2\kappa a}, \\ |\psi_1(x)|^2 &\approx 2|A|^2 \cdot \left\{ 1 + \frac{k_0^2 - \kappa^2}{k_0^2 + \kappa^2} \cdot \cos 2k_0 x - \frac{2k_0\kappa}{k_0^2 + \kappa^2} \cdot \sin 2k_0 x \right\}, \\ |\psi_2(x)|^2 &\approx 8|A|^2 \cdot \frac{k_0^2}{k_0^2 + \kappa^2} \cdot \left\{ \text{ch} 2\kappa(x-a) - \frac{k_0^2 - \kappa^2}{k_0^2 + \kappa^2} \right\} \cdot e^{-2\kappa a}, \\ |\psi_3(x)|^2 &\approx 16|A|^2 \cdot \left(\frac{k_0\kappa}{k_0^2 + \kappa^2} \right)^2 \cdot e^{-2\kappa a}, \\ |\psi_1(0)|^2 &\approx 4|A|^2 \cdot \frac{k_0^2}{k_0^2 + \kappa^2} \approx |\psi_2(0)|^2, \\ |\psi_2(a)|^2 &\approx 16|A|^2 \cdot \left(\frac{k_0\kappa}{k_0^2 + \kappa^2} \right)^2 \cdot e^{-2\kappa a} \approx |\psi_3(a)|^2. \end{aligned} \quad (7.34)$$

На этих асимптотических выражениях легко прослеживается характер поведения $|\psi(x)|^2$, показанный качественно на рис. 7.5.

б) $\varepsilon > U_0$:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A \cdot e^{ik_0 x} + B \cdot e^{-ik_0 x}, \quad x < 0, \\ \psi_2(x) &= A_2 \cdot e^{ikx} + B_2 \cdot e^{-ikx}, \quad 0 < x < a, \\ \psi_3(x) &= A_3 \cdot e^{ik_0 x}, \quad a < x, \\ k_0 &= \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}, \quad k = \frac{\sqrt{2m(\varepsilon - U_0)}}{\hbar}. \end{aligned} \quad (7.35)$$

Легко заметить, что решение (7.27) переходит в (7.35) при замене

$$\kappa \rightarrow ik. \quad (7.36)$$

Соответственно, все результаты пункта а), преобразованные с заменой κ на ik , дают решение для случая б). Ограничимся анализом коэффициентов отражения и прохождения. При подстановке (7.36) в соотношения (7.31) найдем

$$\sigma_r = \frac{[(k_0^2 - k^2) \cdot \sin ka]^2}{|D_k|^2},$$

$$\sigma_r = \frac{(2k_0 k)^2}{|D_k|^2}, \quad (7.37)$$

$$|D_k|^2 = (k_0^2 - k^2)^2 \cdot \sin^2 ka + (2k_0 k)^2.$$

Этот результат принципиально отличается от результата подобной задачи в классической механике: при $\epsilon > U_0$ существует, вообще говоря, вероятность отражения частицы от потенциального барьера, т.е. $\sigma_r > 0!$ В то же время, имеют место режимы "полной прозрачности" барьера:

$$\sigma_r = 0, \quad \sigma_t = 1 \quad \text{при} \quad ka = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (7.38)$$

или

$$a = n \frac{\lambda_U}{2}, \quad \lambda_U = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(\epsilon - U)}}. \quad (7.39)$$

Это явление "резонансной прозрачности" наблюдается в физике электромагнитного излучения (в т.ч. в оптике), и механизм такой избирательной прозрачности используется в так называемых интерференционных фильтрах.

Явление проникновения частиц сквозь потенциальный барьер, превышающий их кинетическую энергию, называется *туннельным эффектом*. Это явление имеет волновое происхождение. Так, в физике электромагнитного излучения (в т.ч. оптике) известен эффект прохождения излучения через щель между двумя средами (A и B (рис. 7.7)) при падении излучения на границу раздела двух сред под углом полного внутреннего отражения. Если ширина щели порядка длины волны излучения, оно частично проникает в среду B.

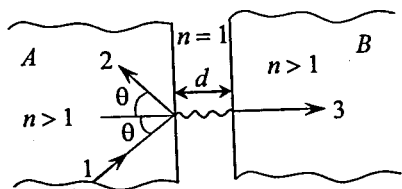


Рис. 7.7. Туннельный эффект при распространении электромагнитной волны в среде с изменяющимся показателем преломления n : 1, 2 – падающий и отражённый лучи, 3 – проходящий луч, $\sin \theta = 1/n$ – полное внутреннее отражение, $\lambda \sim d$

Туннельный эффект был открыт в 1927 г. М.А. Леонтовичем и Л.И. Мандельштамом как результат анализа решения уравнения Шрёдингера

Правда, принятое теперь название этого явления появилось позднее. Это открытие было не случайным, т.к. Л.И. Мандельштам был хорошо знаком с оптическим эффектом "туннелирования" света при полном внутреннем отражении (рис. 7.7)^{*)}

§ 7.3. Метод ВКБ*

Случай "прямоугольного" потенциального барьера, рассмотренный в задаче 7.4, является достаточно частным, когда удаётся найти точное решение уравнения Шрёдингера в аналитических функциях. В квантовой механике в середине 20-х гг. был предложен *метод ВКБ* решения уравнения Шрёдингера для случая гладкой потенциальной функции. Метод получил своё название по заглавным буквам фамилий его авторов: Г. Венцеля (G. Wentzel), Х. Крамерса (H. Kramers) и Л. Бриллюэна (L. Brillouin).

В методе ВКБ решение стационарного уравнения Шрёдингера (7.14) ищут в виде волны де Бройля, амплитуда и фаза которой есть *действительные функции* координат:

$$\psi(x) = A(x) \cdot e^{i\varphi(x)},$$

$$\varphi(x) = \frac{1}{\hbar} \int p(x) \cdot dx. \quad (7.40)$$

Перепишем уравнение (7.14), используя обозначение (7.40):

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -k^2(x) \cdot \psi(x), \quad (7.41)$$

$$k(x) = \frac{p(x)}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(\epsilon - U(x))}}{\hbar}. \quad (7.42)$$

Критерий гладкости (медленного изменения) функций $U(x)$ легко сформулировать, заметив, что при $k(x) = \text{const}$ уравнение (7.41) есть уравнение классического осциллятора. Поэтому функцию $U(x)$ можно считать гладкой, если её изменения на периоде колебаний $2\pi/k$ осциллятора мало:

^{*)} См. Е.Л. Фейнберг, Эпоха и личность. Физики. М.: Изд-во Физико-математической литературы, 2003. С. 29.

$$\Delta U = \frac{dU}{dx} \cdot \frac{2\pi}{k} \ll U. \quad (7.43)$$

Вводя характерную длину ℓ , на которой функция $U(x)$ заметно меняется, т.е.

$$\frac{dU}{dx} \sim \frac{U}{\ell},$$

из (7.43) получим условие гладкости:

$$k\ell \gg 1. \quad (7.44)$$

Подставим решение (7.40) в уравнение (7.41) и сократим экспоненту, входящую множителем в каждое из слагаемых. Получим

$$A'' + 2i\phi'A' + Ai\phi'' - A(\phi')^2 = -k^2A.$$

Здесь штрих означает производную по x .

Разделив действительную и мнимую части полученного равенства, придём к системе двух уравнений:

$$\frac{A'}{A} = -\frac{\phi''}{2\phi'},$$

$$A'' - [(\phi')^2 - k^2(x)]A = 0.$$

Интегрирование первого из этих уравнений даёт

$$\ln A = -\frac{1}{2} \cdot \ln \phi' + \ln C,$$

или

$$A(x) = \frac{C}{\sqrt{\phi'(x)}}, \quad (7.45)$$

где C – константа.

Второе уравнение можно упростить, используя гладкость функции $U(x)$ (7.44). Записав

$$\phi' = \sqrt{k^2(x) + \frac{A''}{A}},$$

учтём, что

$$\frac{A''}{A} \sim \frac{1}{\ell^2} \ll k^2.$$

Тем самым

$$\phi' \approx \pm k(x).$$

Теперь можно окончательно записать решение в виде

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} (Ae^{i\phi(x)} + Be^{-i\phi(x)}),$$

$$\phi(x) = \int_{x_0}^x k(\xi) d\xi. \quad (7.46)$$

Точность решения (7.46) видна из сделанного приближения – отброшены члены порядка $1/(k\ell)^2$.

Условие гладкости потенциальной функции (7.44) можно представить в виде

$$\frac{p(x)}{\hbar} \cdot \ell \gg 1,$$

или

$$\lambda_D = \frac{2\pi\hbar}{p} \ll \ell.$$

Это означает, что микрочастица ведёт себя в силовом поле $U(x)$ как "точка", размеры которой много меньше характерной длины изменения функции $U(x)$, т.е. так же, как и в классической задаче о частице в поле сил. Отсюда и другое название метода ВКБ – *квазиклассическое приближение*.

Используя метод ВКБ, можно, как уже сказано выше, получить более точное, чем (7.25), значение коэффициента прозрачности потенциального барьера. Для этого запишем уравнение (7.46) для области 2, где $U(x) > \varepsilon$, ($x_1 \leq x \leq x_2$, рис. 7.5), введя обозначение (сравни (7.27))

$$\kappa(x) = \frac{\sqrt{2m(U(x) - \varepsilon)}}{\hbar} = ik(x)$$

и сохранив, из очевидных физических соображений, только отрицательную экспоненту:

$$\psi_2(x) = \frac{A_2}{\sqrt{\kappa(x)}} \cdot e^{-\phi_2(x)}, \quad \phi_2(x) = \int_{x_1}^{x_2} \kappa(x) \cdot dx, \quad (7.47)$$

$$x_1 \leq x \leq x_2.$$

В областях 1 ($x < x_1$) и 3 ($x > x_2$) решение имеет вид (7.46) при $k(x) > 0$. Нам предстоит найти, как и в задаче 7.4, коэффициенты A_1, B_1, A_2, A_3, B_3 в каждой из трёх областей. Для этого нужно было бы воспользоваться граничными условиями (7.15), если бы не одна трудность: условие гладкости (7.44) нарушается в точках остановки классической частицы $x = x_{1,2}$, т.к. в этих точках $k(x_{1,2}) = 0$. На помощь приходит опять-таки приближённое решение — можно вблизи этих точек воспользоваться разложением функции $k(x)$, ограничившись линейным членом разложения по x :

$$k(x) \approx \left. \frac{dk}{dx} \right|_{x=x_{1,2}} \cdot (x - x_{1,2})$$

Можно показать, что в этом случае решение в областях 1 и 3 имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_{1,3}(x) &= \frac{A_{1,3}}{2\sqrt{k(x)}} \cdot \left(e^{i\varphi_{1,3}(x)} + e^{-i\varphi_{1,3}(x)} \right) \\ \varphi_1(x) &= \int_x^{x_1} k(x) \cdot dx + \frac{\pi}{4}, \quad \varphi_3(x) = \int_{x_2}^x k(x) \cdot dx + \frac{\pi}{4}, \\ x < x_1 \quad \text{и} \quad x > x_2. \end{aligned} \quad (7.48)$$

Детали вывода этого выражения можно найти в [1], § 47.

В точках x_1 и x_2 функции $\varphi_1(x_1)$, $\varphi_2(x_1)$ и $\varphi_3(x_2)$, а также функции $k(x_1, 3)$ и $k(x_1, 3)$ обращаются в нуль. Поэтому граничные условия, записанные для этих точек, дают

$$\begin{aligned} x = x_1 &\rightarrow A_1 \cdot \cos \frac{\pi}{4} = A_2, \\ x = x_2 &\rightarrow A_2 \cdot e^{-\varphi_2(x_2)} = A_3 \cdot \cos \frac{\pi}{4}, \end{aligned} \quad (7.49)$$

$$\varphi_2(x_2) = \int_{x_1}^{x_2} k(x) \cdot dx.$$

Отсюда коэффициент прозрачности барьера найдём аналогично (7.31), подставив только положительные экспоненты в выражение

$$\sigma_t = \frac{j_3^+(x_2)}{j_1^+(x_1)}.$$

Получим (см. (7.11)):

$$|j_1^+(x_1)| = \frac{\hbar}{m} |A_1|^2 \left(1 - \frac{1}{2k^2(x_1)} \cdot \frac{dk}{dx} \Big|_{x=x_1} \right).$$

Здесь возникает следующая трудность, связанная с тем, что $k(x_1) = 0$. Но из условия гладкости (7.44) второе слагаемое везде, кроме точек x_1 и x_2 , мало:

$$\frac{1}{k^2(x)} \cdot \frac{dk(x)}{dx} \sim \frac{1}{k^2(x)} \cdot \frac{k(x)}{\ell} = \frac{1}{k(x) \cdot \ell} \ll 1.$$

Поскольку приближённое решение (7.48) справедливо (см. [1], § 47) в квазиклассическом приближении, значение $j_1^+(x_1)$ также должно удовлетворять условию гладкости. На этом основании мы и примем, что

$$\left. \frac{1}{k^2(x_1)} \cdot \frac{dk(x)}{dx} \right|_{x=x_1} \ll 1.$$

Таким образом,

$$|j_1^+(x_1)| \approx \frac{\hbar^2}{m} |A_1|^2$$

и, аналогично,

$$|j_3^+(x_1)| \approx \frac{\hbar^2}{2m} |A_3|^2.$$

С учётом (7.49) окончательно найдём

$$\sigma_t \approx \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = e^{-2\varphi_2(x_2)},$$

или

$$\sigma_t \approx \exp \left\{ -\frac{\sqrt{8m}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U(x) - \varepsilon} \cdot dx \right\}. \quad (7.50)$$

По порядку величины это выражение совпадает с оценкой (7.25). Действительно, по теореме о среднем имеем

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U(x) - \varepsilon} \cdot dx \sim \sqrt{U_{\max} - \varepsilon} \cdot \ell = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\lambda_U}},$$

что и приводит к (7.25).

Заметим, что приближение, сделанное при выводе выражения для $j_1^*(x_1)$, имеет точность порядка отлчия от единицы отношения

$$\left(\left. \frac{dk}{dx} \right|_{x=x_2} / \left. \frac{dk}{dx} \right|_{x=x_1} \right)^2$$

В этом убедимся, учтя, что $k(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow x_1, x_2$ можно пренебречь единицей в скобке выражения для f^* и вычислить дробь $|j_2^*/j_1^*|$. При этом бесконечности $1/k^2(x_2)$ и $1/k^2(x_1)$ взаимно сократятся.

§ 7.4. α -распад*

Один из трёх видов радиоактивности ядер, открытый А. Беккерелем (§ 1.2), состоит в самопроизвольном испускании ядрами атомов вещества α -частиц (ядер гелия ${}^4_2\text{He}^{2+}$). По своей природе это чисто квантовое явление – проникновение α -частицы через потенциальный барьер (*туннелирование*), образованный притягивающим потенциалом сил ядерного взаимодействия нуклонов ядра и отталкивающим потенциалом сил электромагнитного взаимодействия протонов ядра. Именно на таких представлениях основана теория α -распада, созданная Г.А. Гамовым в 1927 г.^{*)}

Оценим коэффициент прозрачности потенциального барьера ядра, а по нему – значение времени жизни α -радиоактивного ядра. Суммарный потенциал, в котором движется α -частица, можно приближённо представить в виде сферически-симметричной функции (штрихпунктирная кривая на рис. 7.8)

$$U(r) \sim \begin{cases} U_{\max} \frac{r_0}{r}, & r \geq r_0, \\ -U_0, & r < r_0. \end{cases} \quad (7.51)$$

Здесь U_{\max} – максимальное значение потенциальной энергии ядра, r_0 – радиус действия ядерных сил, $-U_0$ – минимальное значение потенциальной энергии (глубина потенциальной ямы для α -частицы в ядре). Дальше мы увидим, что

^{*)} Г.А. Гамов дал объяснение природы α -распада, познакомившись с работой М.А. Леонтовича и Л.И. Мандельштама об эффекте туннелирования (см. § 7.2 и ссылку там).

прозрачность барьера очень критична к выбору значения U_{\max} . Грубо эту величину можно оценить как

$$U_{\max} \sim \frac{Z_\alpha(Z-Z_\alpha) \cdot e^2}{r_0}, \quad (7.52)$$

где $Z_\alpha e = 2e$ – заряд α -частицы, Ze – заряд исходного (не распавшегося) ядра. Не менее критичен выбор значения r_0 . Эта величина связана с атомным весом ядра:

$$r_0 \sim (1,2-1,4) \cdot A^{1/3} \cdot 10^{-13} \text{ см}. \quad (7.53)$$

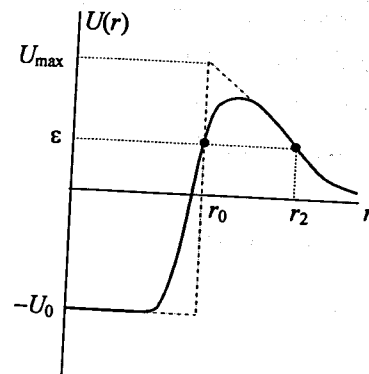


Рис. 7.8. Потенциальная энергия α -частицы в атоме (сплошная кривая) и её аппроксимация функцией (7.51) (штрихпунктирная кривая)

Для ядра ${}^{238}_{92}\text{U}$ находим

$$r_0 \approx 0,9 \cdot 10^{-12} \text{ см}, \\ U_{\max} \approx 29 \text{ МэВ}.$$

Фактически значение U_{\max} меньше (см. ниже).

Пусть α -частица в ядре имеет энергию (температуру)

$$0 < \epsilon < U_{\max}.$$

Она не может преодолеть потенциальный барьер, "перепрыгнув" через него. Но существует конечная вероятность *туннелирования*. Рассмотрим эту задачу.

Поскольку в данном случае мы имеем дело со сферически-симметричной функцией потенциальной энергии, воспользоваться прямо результатами §§ 7.2, 7.3 нельзя – там был рассмотрен одномерный случай. Теперь мы должны вместо (7.14), (7.41) записать

$$\Delta\psi(\vec{r}) = -k^2(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}),$$

$$k(\vec{r}) = \frac{\sqrt{2m(\varepsilon - U(\vec{r}))}}{\hbar}, \quad (7.54)$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Последнее выражение есть оператор Лапласа (6.2), записанный в сферических координатах. Сферическая симметрия функции $U(\vec{r})$ не означает тем не менее, что решение уравнения (7.54) не зависит от угловых координат θ и φ . Однако в общем случае эта задача очень громоздкая и требует привлечения аппарата шаровых функций (§ 10.4). Поэтому здесь мы ограничимся простейшим частным случаем частицы, орбитальный момент которой (см. гл. 10) равен нулю. Тогда решение уравнения Шрёдингера не зависит от θ и φ , а зависит только от r :

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi(r)}{dr} \right) = -k^2(r) \cdot \psi(r).$$

Подстановкой

$$\psi(r) = \frac{f(r)}{r} \quad (7.55)$$

уравнение Шрёдингера для сферически-симметричного потенциала (при нулевом орбитальном моменте частицы!) сводится к тому же виду, что и уравнение (7.41):

$$\frac{d^2 f(r)}{dr^2} = -k^2(r) \cdot f(r).$$

Поэтому для функции $f(r)$ справедливы все соотношения, полученные в § 7.3 для одномерного случая $U(x)$. Теперь вместо (7.46) можно записать

$$\psi(r) = \frac{1}{r\sqrt{k(r)}} \cdot (A \cdot e^{i\varphi(r)} + B \cdot e^{-i\varphi(r)}), \quad (7.56)$$

$$\varphi(r) = \int_0^r k(\xi) \cdot d\xi.$$

Дальше нужно проследить, как "сферичность" решения отразится на выражении для σ_r . Вектор плотности потока вероятности имеет только радиальную компоненту

$$j_r = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{d\psi^*}{dr} - \psi^* \frac{d\psi}{dr} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \cdot \frac{1}{r^2} \left(f \frac{df^*}{dr} - f^* \frac{df}{dr} \right).$$

Это выражение отличается от одномерного множителем r^{-2} . Проследив все преобразования, в результате которых получено выражение для σ_r (7.50), приходим к выводу, что и для сферически-симметричного потенциала оно остаётся справедливым.

Таким образом, прозрачность потенциального барьера α -радиоактивного ядра описывается соотношением

$$\sigma_t = \exp \left\{ -\frac{\sqrt{8m}}{\hbar} \int_0^{r_2} \sqrt{U(r) - \varepsilon} \cdot dr \right\}, \quad \text{где } r_2 = r_0 \cdot \frac{U_{\max}}{\varepsilon}. \quad (7.57)$$

Одновременно это есть вероятность появления α -частицы у левой границы потенциального барьера $r = r_0$. При энергии α -частицы в ядре, равной ε , периодичность её появления в точке r_0 равна

$$T = \frac{2r_0}{v_\alpha}, \quad \text{где } v_\alpha = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}$$

— скорость α -частицы внутри ядра. Соответственно, время жизни α -частицы в ядре есть

$$\tau_\alpha = T/\sigma_t.$$

Интеграл в (7.57) вычислим, подставив

$$U(r) = U_{\max} \cdot r_0/r.$$

Найдём

$$\text{Int} = \int_0^{r_2} \sqrt{U_{\max} \frac{r_0}{r} - \varepsilon} \cdot dr = 2\sqrt{\varepsilon} \int_0^{\sqrt{r_2}} \sqrt{a^2 - x^2} \cdot dx,$$

$$a^2 = r_0 \frac{U_{\max}}{\varepsilon} = r_2.$$

Отсюда

$$\text{Int} = \sqrt{\varepsilon} \cdot \left[x \cdot \sqrt{a^2 - x^2} + a^2 \arcsin \frac{x}{a} \right]_{\sqrt{r_0}}^{\sqrt{r_2}} \approx \sqrt{\varepsilon} r_0 \left(\frac{\pi}{2} \cdot \frac{U_{\max}}{\varepsilon} - 1 - \sqrt{\frac{U_{\max}}{\varepsilon} - 1} \right).$$

Окончательно найдём

$$\tau_{\alpha} \sim \sqrt{\frac{2mc^2}{\varepsilon}} \cdot \frac{r_0}{c} \cdot \exp\left\{\frac{\sqrt{8mc^2\varepsilon}}{\hbar} \cdot \frac{r_0}{c} \cdot F(\xi)\right\}, \quad (7.58)$$

$$\xi = \frac{U_{\max}}{\varepsilon}, \quad F(\xi) = \frac{\pi}{2} \cdot \xi - 1 - \sqrt{\xi - 1}.$$

Отсюда видно, что время жизни α -частицы в ядре почти экспоненциально зависит от параметра ξ . К тому же множитель перед $F(\xi)$ в показателе экспоненты много больше единицы, что усиливает экспоненциальную зависимость $\tau_{\alpha}(\xi)$. Так, подставив в (7.58) значения параметров для α -радиоактивного ядра ${}_{92}^{238}\text{U}$

$$\varepsilon = 4,2 \text{ МэВ (энергия вылетающих } \alpha\text{-частиц),}$$

$$U_{\max} = 29 \text{ МэВ (оценка (7.52)),}$$

$$r_0 = 0,9 \cdot 10^{-12} \text{ см,}$$

$$mc^2 \approx 4 \cdot 938 \text{ МэВ,}$$

найдем время жизни этого ядра

$$\tau_{\alpha} \approx 0,9 \cdot 10^{31} \text{ с} \approx 3 \cdot 10^{23} \text{ лет,}$$

а выбрав $U_{\max} = 23 \text{ МэВ}$, получим

$$\tau_{\alpha} \approx 3 \cdot 10^{17} \text{ с} \approx 9,5 \cdot 10^9 \text{ лет,}$$

что удовлетворительно согласуется с экспериментальным результатом

$$\tau_{\text{exp}} = 4,468(3) \cdot 10^9 \text{ лет.}$$

Заметим, что влияние орбитального момента α -частицы на время жизни ядра довольно слабое.

§ 7.5. Частица в потенциальной яме

Важный класс квантово-механических задач, описывающих поведение атомов, молекул, кристаллов, других квантовых систем, имеет дело с частицей, движущейся внутри ограниченного объема, "стенками" которого служат эквипотенциальные поверхности. В простейшей задаче такого рода анализируется движение частицы в одномерном силовом поле, потенциальная энергия которого описывается функцией (рис. 7.9)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -U_0, & 0 < x < a, \\ 0, & a < x. \end{cases} \quad (7.59)$$

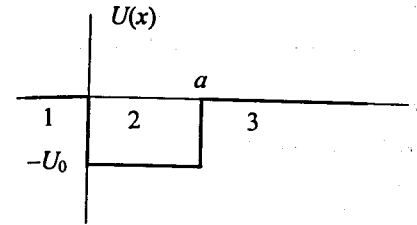


Рис. 7.9. Распределение потенциала (7.59) – потенциальная яма

Этот частный и достаточно простой случай позволяет получить характерные закономерности поведения частицы в "яме". Легко сообразить, что "яма" (7.59) является перевернутым "барьером" (7.26). Соответственно, можно указать на два случая, отличающихся поведением частицы:

- $-U_0 < \varepsilon < 0$ – частица "болтается" в яме,
- $0 < \varepsilon$ – частица "пролетает" над ямой.

Начнем с первого случая. Аналогично (7.27) запишем решение уравнения Шрёдингера:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 \cdot e^{\kappa x}, \quad x < 0, \\ \psi_2(x) &= A_2 \cdot e^{ikx} + B_2 \cdot e^{-ikx}, \quad 0 < x < a, \\ \psi_3(x) &= A_3 \cdot e^{-\kappa x}, \quad a < x, \end{aligned} \quad (7.60)$$

$$k = \sqrt{2m(U_0 - |\varepsilon|)}/\hbar, \quad \kappa = \sqrt{2m \cdot |\varepsilon|}/\hbar.$$

В первой и третьей областях мы оставили только экспоненциально убывающие члены. Граничные условия, аналогично (7.28), дают

$$\begin{aligned} A_1 &= A_2 + B_2, \\ \kappa A_1 &= ik(A_2 - B_2), \\ A_3 \cdot e^{-\kappa a} &= A_2 \cdot e^{ika} + B_2 \cdot e^{-ika}, \\ -\kappa A_3 \cdot e^{-\kappa a} &= ik(A_2 \cdot e^{ika} - B_2 \cdot e^{-ika}). \end{aligned} \quad (7.61)$$

В отличие от (7.28) здесь четыре уравнения и четыре неизвестных амплитуды, поэтому ненулевое решение системы уравнений существует при равном нулю детерминанте:

$$(\kappa - ik)^2 = (\kappa + ik)^2 \cdot e^{-2ika}. \quad (7.62)$$

Раскрывая скобки и приравнявая друг к другу действительные члены равенства и, независимо, мнимые, найдем

$$\text{Re} \Rightarrow (\kappa^2 - k^2) \cdot (1 - \cos 2ka) = 2k\kappa \cdot \sin 2ka,$$

$$\text{Im} \Rightarrow 2k\kappa(1 + \cos 2ka) = (\kappa^2 - k^2) \cdot \sin 2ka.$$

Легко убедиться, что оба эти равенства приводят к одному и тому же уравнению для k :

$$\text{tg} ka = \frac{2k\kappa}{\kappa^2 - k^2},$$

или

$$\sin ka = \frac{2k\kappa}{\kappa^2 + k^2}. \quad (7.63)$$

Это трансцендентное уравнение можно разрешить относительно энергии ϵ численно для заданных значений параметров частицы и ямы. Качественный анализ проведем, воспользовавшись графическим методом решения уравнения

$$f_1(\epsilon) = f_2(\epsilon), \quad (7.64)$$

где $f_1(\epsilon) = \sin ka$, $f_2(\epsilon) = \frac{2k\kappa}{\kappa^2 + k^2}$, $k = k(\epsilon)$, $\kappa = \kappa(\epsilon)$. Анализ упрощается, если ввести параметр

$$u_0 = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}.$$

Тогда функции $f_1(\epsilon)$ и $f_2(\epsilon)$ можно записать в виде явной зависимости от k :

$$f_1(k) = \sin ka, \quad f_2(k) = \frac{2k\sqrt{u_0^2 - k^2}}{u_0^2}, \quad (7.65)$$

и представить графически (рис. 7.10). Корни k_n этого уравнения (им соответствуют точки пересечения функций $f_1(k)$ и $f_2(k)$ на рис. 7.10) дают значения энергии частицы, при которых она может существовать в яме — уровни энергии:

$$\epsilon_n = -U_0 + \frac{(k_n \hbar)^2}{2m}. \quad (7.66)$$

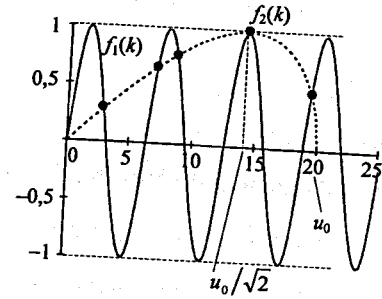


Рис. 7.10. Графическое решение уравнения (7.64), точки пересечений кривых $f_1(k)$ и $f_2(k)$ дают значения k_n (изображены функции (7.65) для $a=1$, $U_0=20$)

Функция $f_2(k)$ определена на интервале $(0, u_0)$ и достигает максимума, равного 1, в точке $k = u_0/\sqrt{2}$.

При малых u_0 ("мелкая" яма) частицы могут вообще не захватываться в потенциальную яму. Очевидно (рис. 7.10), это имеет место при

$$k_{\max} a < \frac{\pi}{2}, \quad k_{\max} \equiv u_0, \quad \text{т.е.} \quad u_0 < \frac{\pi}{2a}. \quad (7.67)$$

Отсюда условие "мелкой" ямы есть

$$u_0 < \frac{\pi}{2a}, \quad \text{или} \quad U_0 < \frac{1}{8m} \cdot \left(\frac{\pi \hbar}{a}\right)^2 \equiv U_{\min}. \quad (7.68)$$

Этот результат имеет ясный физический смысл. Энергия частицы в яме по абсолютному значению не превосходит U_0 (см. значение k в (7.60)):

$$|\epsilon| \leq U_0.$$

Отсюда, с учётом значения U_0 из (7.68), следует, что частица не влезет в "яму", если её импульс

$$p < p_{\min} = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{\pi}{a}.$$

Таким образом, и в этом примере соотношение неопределённости координаты – импульса ограничивает точности одновременного измерения координаты ($x \sim a$) и импульса ($p \sim p_{\min} \sim \hbar/a$) частицы.

Условие (7.68) можно также связать с де-бройлевской волной частицы, записав его в виде

$$a < \frac{\pi}{2} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}} = \frac{h}{4p_{\min}} = \frac{\lambda_{\max}}{4}, \quad (7.69)$$

где λ_{\max} – значение волны де Бройля для частицы с импульсом, соответствующим энергии $\mathcal{E} = U_0$. Таким образом, условие отсутствия захвата частицы в потенциальную яму можно рассматривать как несоответствие λ_D размеру ямы: де-бройлевская волна "не умещается" в потенциальной яме.

Отметим, что в отличие от задачи 6.3 (частица в потенциальном ящике) предельный случай бесконечно большого и отрицательного потенциала не имеет решения: формально в уравнении Шрёдингера появляется "неопределённая" бесконечность. Таким образом, напрямую переход $U \rightarrow -\infty$ ($U_0 \rightarrow \infty$) в полученном решении произвести не удастся. Переход к "ящику" с конечной высотой стенок производится, как нетрудно сообразить, заменой

$$U_0 - |\varepsilon| \rightarrow \varepsilon > 0, \\ |\varepsilon| \rightarrow U_0 - \varepsilon > 0.$$

Тогда в уравнении (7.63) при $U \rightarrow \infty$ приходим к условию ($\kappa \gg k$)

$$\sin ka \approx 2 \frac{k}{\kappa} \rightarrow 0,$$

т.е.

$$ka \rightarrow n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

что совпадает с (6.21).

Для вычисления коэффициентов $A_1, 2, 3$ и B_2 нужно разрешить уравнения (7.61) относительно, например, A_1 и затем произвести нормировку:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \cdot dx = \int_{-\infty}^0 |\psi_1(x)|^2 \cdot dx + \int_0^a |\psi_2(x)|^2 \cdot dx + \int_a^{\infty} |\psi_3(x)|^2 \cdot dx = 1,$$

что и даёт значение $|A_1|$, а через него и модулей остальных коэффициентов.

Выражения для коэффициентов, получающиеся при этом, довольно громоздки и

не несут глубокого физического смысла. Заметим только, что в отличие от бесконечно глубокой ямы (задача 6.3 о "ящике") здесь у решения "отрастают" хвосты вероятности присутствия частицы вне ямы – экспоненциально спадающие функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$.

б) $\varepsilon > 0$.

Решение в этом случае получим, заменив в задаче 7.4, б) потенциальную энергию U_0 на $-U_0$. Соответственно, результаты (7.37) дадут нам значения коэффициентов отражения и прохождения для частицы, "пролетающей" над ямой. Отметим, что в этом случае спектр p значений энергии (импульса) частицы *непрерывный*. Тем не менее отражение имеет место и σ_r растет с ростом U_0 , а σ_t падает:

$$\sigma_t = \frac{1}{\frac{U_0 \sin^2 ka}{\sqrt{(U_0 + \varepsilon) \cdot \varepsilon}} + 1} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad U_0 \rightarrow \infty, \\ \sigma_r = 1 - \sigma_t. \quad (7.70)$$

При этом по-прежнему имеют место режимы "полной прозрачности" (7.38). Сформулируем основные результаты рассмотренной задачи:

1) при $\varepsilon < 0$ существуют, вообще говоря, дискретные значения ε_n (7.66), при которых частица существует внутри ямы; минимальное значение U_0 ограничено условием (7.68);

2) при $\varepsilon > 0$ спектр разрешенных значений энергии непрерывный, но вероятность присутствия частицы внутри ямы существенно ограничена и падает с ростом U_0 : растет коэффициент отражения; исключение составляют режимы "полной" прозрачности (7.37), когда частица "не замечает" присутствия ямы.

Задача 7.5. Найти минимальное значение потенциала U_0 , при котором электрон захватывается в "яму" протяженностью $a = 1 \text{ \AA}$.

$$U_{\min} = \frac{1}{8mc^2} \cdot \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 = \frac{1}{8 \cdot 0,51 \text{ МэВ}} \cdot \left(\frac{\pi \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с} \cdot 6,6 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{с}}{10^{-8} \text{ см}} \right)^2 = 9,48 \text{ эВ}.$$

Таким образом, получились вполне "атомные" величины (сравни $R_{\text{Бор}} = 0,529 \text{ \AA}$ (2.5) и $\varepsilon_1 = -13,6 \text{ эВ}$ (2.7)).

§ 7.6. Нейтрон в гравитационном поле

Красивым примером квантования энергии частицы в потенциальной яме является уникальный эксперимент, в котором впервые прецизионно измерялась энергия ультрахолодных нейтронов, "падающих" в гравитационном поле Земли (В.И. Луциков, В.Н. Несвижевский, А.В. Стрелков и др., 2002 г.). Конечно, "подвесить" нейтрон и дать ему падать в поле Земли невозможно. В эксперименте (рис. 7.11) формировался поток ультрахолодных нейтронов (УХН), скорость которых составляла около 5 м/с. Для этого поток нейтронов из ядерного реактора в Гренобле (Франция) пропусклся через замедлитель – сжиженный водород при температуре ниже 20 К. В результате упругого рассеяния нейтронов на ядрах водорода – протонах – в потоке нейтронов устанавливается максвелловское распределение по скоростям, соответствующее этой температуре. Затем поток холодных нейтронов пропусклся через нейтроновод-сепаратор, представлявший собой трубу, изогнутую в горизонтальной плоскости. В этом сепараторе быстрые (холодные) нейтроны погибали, сталкиваясь со стенкой трубы, а медленные (ультрахолодные) отражались, "вытекая" через трубу в объём. Изгиб нейтропровода в горизонтальной плоскости, а не в вертикальной, необходим принципиально – в противном случае заметная часть ультрахолодных нейтронов получит в столкновениях со стенками существенное увеличение вертикальной скорости, что, очевидно, недопустимо по условиям эксперимента. Внутри объёма ультрахолодные нейтроны могут жить очень долго, путешествуя от стенки к стенке и упруго отражаясь от них. Часть этих нейтронов через выходное отверстие "вытекала" в пространство между "зеркалом" и поглотителем. "Зеркало" – стеклянная пластина, отполированная до оптической чистоты, хорошо отражает ультрахолодные нейтроны, падающие на его поверхность под малым углом скольжения. Вертикальная составляющая скорости нейтронов мала благодаря методу формирования потока. Поэтому траектория нейтронов – сильно вытянутая парабола. Поглотитель (пластина полиэтилена с шероховатой поверхностью) ограничивает высоту параболы. Детектор, расположенный на

выходе (рис. 7.11), регистрирует полный поток нейтронов, проходящий через щель, образованную зеркалом и поглотителем.

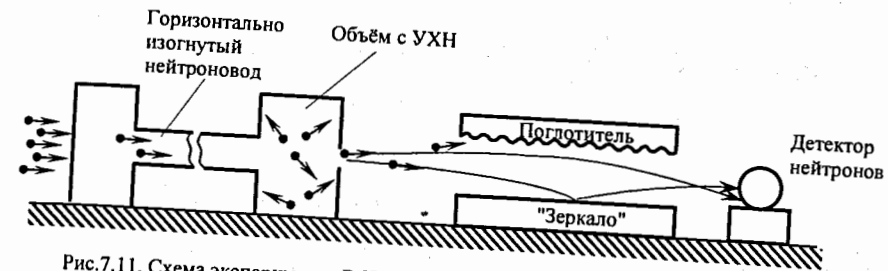


Рис. 7.11. Схема эксперимента В.И. Луцикова, В.Н. Несвижевского и А.В. Стрелкова

Для проявления квантовых эффектов в данном эксперименте необходимо, чтобы время пролета нейтрона через щель было достаточно велико, так чтобы соотношение неопределенностей позволило измерить энергию вертикального движения с необходимой точностью. В эксперименте это время составляло порядка 1 мс, для чего требовалось, чтобы горизонтальная компонента их скорости была порядка 5 м/с. Это достигалось отбором (сепарацией) ультрахолодных нейтронов, как описано выше.

В эксперименте измерялась интенсивность потока нейтронов $\dot{N}(z)$, проходящих в детектор, в зависимости от размера z щели между зеркалом и поглотителем. Классическая механика "предписывает", что в этом случае функция $\dot{N}(z)$ монотонно возрастает с z (рис. 7.12, кривая 1). Эксперимент дал качественно иную зависимость: функция $\dot{N}(z)$ имела ярко выраженные "ступеньки" и "полочки", соответствующие дискретным значениям энергии вертикального движения нейтрона (рис. 7.12, кривая 2). Решение задачи о движении нейтрона в потенциальной яме, образованной зеркалом и гравитационным полем (рис. 7.13), дает значение энергии квантовых состояний нейтрона в такой яме:

$$\varepsilon_n = C_n (n\sqrt{m\hbar g})^{2/3}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (7.71)$$

где m – масса нейтрона; g – ускорение свободного падения; $C_n \sim 1$ – численные коэффициенты (см. задачи 7.7 и 7.9). Это выражение можно записать в виде, позволяющем легко произвести вычисления в атомных единицах:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= C_n n^{2/3} \left(\sqrt{mc^2} \cdot \frac{\hbar g}{c} \right)^{2/3} = C_n n^{2/3} \left(\sqrt{938 \cdot 10^6} \cdot \frac{6,6 \cdot 10^{-16} \cdot 981}{3 \cdot 10^{10}} \right)^{2/3} = \\ &= 0,759 \cdot 10^{-12} \cdot C_n n^{2/3} \text{ эВ.} \end{aligned}$$

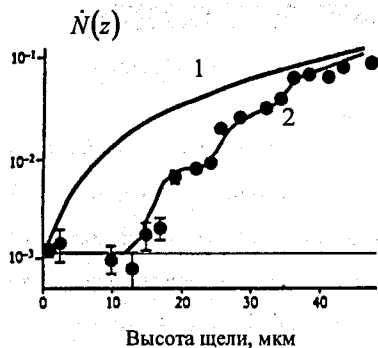


Рис. 7.12. Зависимость интенсивности потока нейтронов $\dot{N}(z)$ от высоты щели z

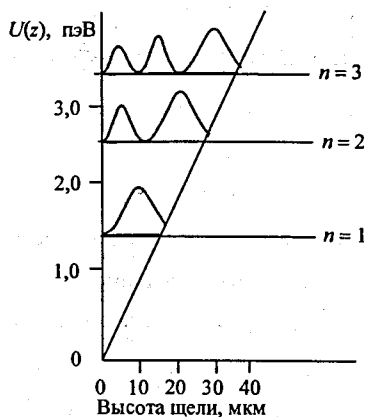


Рис. 7.13. Гравитационная потенциальная яма над зеркалом

Таким образом, разность энергий квантовых уровней вертикального движения нейтрона в гравитационном поле Земли

$$\Delta \varepsilon \sim 1 \text{ пэВ}$$

(1 пикозэлектронвольт = 10^{-12} эВ). Соответственно, расстояние по высоте между уровнями энергии

$$\Delta z = \frac{\Delta \varepsilon}{mg} \sim \frac{10^{-12}}{938 \cdot 10^6 \cdot 981} \cdot (3 \cdot 10^{10})^2 \approx 10 \text{ мкм.}$$

Эти оценки хорошо согласуются с результатами описываемого эксперимента.

Задачи 7.6 – 7.9 позволяют лучше понять условия данного эксперимента и почувствовать порядки величин в нем.

Задача 7.6. Оценить среднюю скорость холодных нейтронов в эксперименте Луцкого–Несвижевского–Стрелкова, если температура потока составляет 20 К. Какая доля потока имеет скорость 5 м/с?

Из равенства

$$\frac{mv_T^2}{2} = \frac{T}{2}, \quad T = 20 \text{ К} = 1,8 \text{ мэВ}$$

находим

$$v_T = c \sqrt{\frac{T}{mc^2}} = 415,2 \text{ м/с.}$$

Здесь $mc^2 \approx 939,6 \text{ мэВ}$ – энергия покоя нейтрона. При скорости 5 м/с температура ультрахолодных нейтронов составляет

$$T_{\text{ultra}} = mc^2 \left(\frac{v_{\text{ultra}}}{c} \right)^2 = 0,26 \text{ мкэВ} \approx 2,9 \text{ мК.}$$

Полный поток холодных нейтронов вдоль оси x при температуре T равен

$$\dot{N}_{\text{cold}} = \int_0^{\infty} v_x \cdot f(v_x) dv_x \int_{-\infty}^{\infty} f(v_y) \cdot f(v_z) \cdot dv_y dv_z,$$

где

$$f(\vec{v}) = C \cdot \exp \left\{ - \frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2T} \right\},$$

C – константа, которую найдём в результате интегрирования:

$$\dot{N}_{\text{cold}} = C \cdot \frac{2\pi T^2}{m^2}.$$

Первый интеграл берётся от нуля до бесконечности, поскольку в потоке, направленном по x , скорость $v_x > 0$. Долю ультрахолодных нейтронов в этом потоке вычислим, проинтегрировав аналогично по скоростям ультрахолодных нейтронов:

$$\dot{N}_{\text{ultra}} = \int_0^{v_{\text{ultra}}} v_x \cdot f(v_x) dv_x \iint_{v_{\text{ultra}}} f(v_y) \cdot f(v_z) \cdot dv_y dv_z.$$

Учитывая, что $T_{\text{ultra}} \ll T$, получим

$$\frac{\dot{N}_{\text{ultra}}}{\dot{N}_{\text{cold}}} \approx \frac{2m^2 v_{\text{ultra}}^4}{\pi T^2} = \frac{2}{\pi} \cdot \left(\frac{T_{\text{ultra}}}{T} \right)^2.$$

Для $T = 20 \text{ К}$ и $T_{\text{ultra}} = 2,9 \text{ мК}$ это даёт долю УХН порядка $1,3 \cdot 10^{-8}$.

Задача 7.7. Оценить значения уровней энергии для нейтрона, захваченного в гравитационную потенциальную яму.

Грубую оценку можно получить, воспользовавшись результатами задачи 6.3 о частице в "ящике". Из условия (6.22) имеем связь между импульсом частицы (энергией уровня) и размером "ямы" на этом уровне:

$$p_n a = \pi \hbar, \quad \text{где} \quad a \cdot mg = \varepsilon_n.$$

Отсюда

$$\varepsilon_n \sim (nm^{1/2} \hbar g)^{2/3}.$$

Энергия первого ($n = 1$) уровня есть

$$\varepsilon_1 \sim \left((939 \cdot 10^9)^{1/2} \frac{6,6 \cdot 10^{-16}}{3 \cdot 10^{10}} \cdot 981 \right)^{2/3} \approx 8 \cdot 10^{-13} \text{ эВ} \equiv 0,8 \text{ пэВ}.$$

Это соответствует высоте

$$\Delta z_1 \sim \frac{\varepsilon_1}{mg} \sim \frac{8 \cdot 10^{-13}}{939 \cdot 10^6 \cdot 981} \cdot (3 \cdot 10^{10})^2 \approx 7 \text{ мкм}.$$

Отметим, что более точный расчет дает близкие значения ε_1 и Δz_1 (задача 7.9).

Задача 7.8. Оценить горизонтальную скорость нейтронов, при которой можно наблюдать эффект квантования энергии нейтрона в гравитационном поле.

Из соотношения неопределенностей энергии – времени и значения ε_n (задача 7.7) находим ограничение на время пролета нейтрона через щель:

$$\Delta t \geq \frac{\hbar}{\varepsilon_1} \sim \frac{6,6 \cdot 10^{-16}}{8 \cdot 10^{-13}} \sim 1 \text{ мс}.$$

При длине щели 10 см это дает максимальную скорость нейтронов ≤ 10 м/с, или кинетическую энергию горизонтального движения

$$\varepsilon_0 = \frac{mV^2}{2} \leq \frac{1}{2} \cdot \frac{(10^3 \text{ см/с})^2}{(3 \cdot 10^{10} \text{ см/с})^2} \cdot 939 \cdot 10^6 \text{ эВ} \approx 0,55 \text{ мкэВ} \approx 6 \text{ мК}.$$

Задача 7.9. Найти решение уравнения Шрёдингера для нейтрона, движущегося вертикально, в поле тяготения у поверхности Земли.

Указание: решение искать в виде ряда по степеням вертикальной координаты. Обосновать справедливость такого приближения.

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера (7.14) для случая гравитационного поля:

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [mgz - \varepsilon] \cdot \psi(z).$$

Заменой переменных

$$x = \alpha_g \cdot \left(\frac{\varepsilon}{mg} - z \right), \quad \alpha_g = \left(\frac{2g}{c^{4/3}} \right)^{1/3} \cdot \left(\frac{mc^2}{\hbar} \right)^{2/3}$$

это уравнение преобразуется к виду

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + x \psi = 0.$$

Отметим, что коэффициент α_g представлен здесь в виде, удобном для вычисления в атомных единицах:

$$\alpha_g = \frac{(2 \cdot 981)^{1/3}}{(3 \cdot 10^{10})^{4/3}} \cdot \left(\frac{939 \cdot 10^6}{6,6 \cdot 10^{-16}} \right)^{2/3} = 17,715 \text{ м}^{-1}.$$

Поскольку $z \leq 40$ мкм (рис.7.12), то $x \sim 5 \cdot 10^{-4}$ – малая безразмерная величина. Поэтому будем искать $\psi(x)$ в виде ряда

$$\psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad (7.72)$$

ограничившись первыми членами разложения. Как будет понятно дальше, для нахождения функции $\psi_1(x)$ первого уровня необходимо рассмотреть ряд до x^4 по крайней мере:

$$\psi_1(x) \approx a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + a_5 x^5 + \dots$$

Подставляя это выражение в уравнение для $\psi_1(x)$ и приравнявая коэффициенты при x в одинаковых степенях, найдем:

$$a_2 = 0, \quad 3 \cdot 2 \cdot a_3 + a_0 = 0, \quad 3 \cdot 4 \cdot a_4 + a_1 = 0, \quad a_2 + 5 \cdot 4 \cdot a_5 = 0.$$

Отсюда

$$a_2 = a_5 = 0, \quad a_3 = -\frac{a_0}{6}, \quad a_4 = -\frac{a_1}{12},$$

и приближенное решение имеет вид

$$\psi_1(x) = a_0 + a_1 x - \frac{a_0}{6} x^3 - \frac{a_1}{12} x^4.$$

Запишем граничные условия на стенках потенциальной ямы (рис. 7.13):

$$\psi(x) = 0 \quad \text{при} \quad z = 0, \quad \frac{\varepsilon}{mg}.$$

Отсюда при $z = \varepsilon/mg$ имеем $x = 0$ и условие $\psi(x=0) = 0$ дает $a_0 = 0$. В результате решение упрощается до двучлена

$$\psi_1(x) \approx a_1 x \left(1 - \frac{x^3}{12}\right).$$

Граничное условие при $z = 0$ ($x = x_0 \equiv \alpha \varepsilon / mg$) дает уравнение

$$a_1 x_0 \left(1 - \frac{x_0^3}{12}\right) = 0,$$

из решений которого только одно имеет физический смысл:

$$x_0 = (12)^{1/3} = 2,2894.$$

Отсюда находим энергию первого уровня нейтрона в гравитационном поле Земли:

$$\varepsilon_1 = 2,2894 \frac{mg}{\alpha_g} = 1,817 \cdot (\sqrt{m} \hbar g)^{2/3}.$$

Как мы видим, это значение с точностью до численного коэффициента согласуется с "грубо приближенным" результатом задачи 7.7.

Функция $\psi_1(x)$ имеет один максимум при $x = 3^{1/3}$ (рис. 7.13). Для нахождения $\psi_n(x)$ второго и следующего уровней в решении (7.72) нужно удерживать все больше и больше членов. Волновая функция $\psi_n(x)$ будет приближенно описываться многочленами, имеющими n максимумов на отрезке $\{0, x_0\}$ (рис. 7.13).

Эксперимент Лушикова–Несвижевского–Стрелкова имеет принципиальное значение: впервые в лабораторных условиях экспериментально показано, что поведение частицы в гравитационном поле подчиняется тем же законам квантовой механики, что и в других видах фундаментальных взаимодействий.

§ 7.7. Квантовый осциллятор

Во многих случаях поведение квантово-механической системы хорошо описывается моделью одномерного *линейного осциллятора*

$$U(x) = \frac{\alpha x^2}{2}, \quad (7.73)$$

где α – константа. Записав уравнение Шрёдингера (7.14) в виде

$$\hat{d} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{\alpha x^2}{2} - \varepsilon \right] \cdot \psi(x), \quad (7.74)$$

приведем его к более компактной форме, для чего введем безразмерные переменные

$$\xi = \frac{x}{x_0}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{(\alpha m)^{1/2}}},$$

$$\varepsilon_0 = \frac{2\varepsilon}{\hbar \omega_0}, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}.$$

(7.75)

Ясно, что ω_0 – то же, что и частота классического осциллятора. Подстановка

$x = \xi x_0$ и $\varepsilon = \varepsilon \hbar \omega_0 / 2$ в (7.74) дает

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + (\varepsilon_0 - \xi^2) \cdot \psi = 0. \quad (7.76)$$

При $\xi \rightarrow \infty$ ($\xi^2 \gg \varepsilon$) это уравнение принимает вид

$$\psi'' - \xi^2 \psi = 0. \quad (7.77)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде

$$\psi_\infty(\xi) = A \cdot e^{f(\xi)}.$$

Подстановка этого решения в (7.77) приводит к уравнению для $f(\xi)$:

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} + \left(\frac{df}{d\xi}\right)^2 - \xi^2 = 0.$$

Решение этого уравнения будем искать в виде степенной функции

$$f(\xi) = B \xi^n,$$

и подстановка $f(\xi)$ в уравнение (7.77) дает

$$Bn(n-1)\xi^{n-2} + B^2 n^2 \xi^{2(n-1)} - \xi^2 = 0.$$

Нетрудно догадаться, что второе слагаемое много больше первого, если $n > 1$ и $\xi \gg 1$ (т.е. $\xi^n \gg 1$). Поэтому первым слагаемым можно пренебречь, приравняв показатели степени ξ у второго и третьего членов, найдем

$$n = 2, \quad B = \pm \frac{1}{2}. \quad (7.78)$$

Таким образом, мы получили

$$f(\xi) = \pm \frac{\xi^2}{2},$$

$$\psi_\infty(\xi) = A_1 \cdot e^{\xi^2/2} + A_2 \cdot e^{-\xi^2/2}.$$

Первое слагаемое физически бессмысленно, т.к. при любых ξ (т.е. x) функция $\psi(x) < \infty$ ограничена, и асимптотическое поведение ($\xi \rightarrow \infty$) функции $\psi(\xi)$ описывается вторым слагаемым в этом выражении.

Полное решение $\psi(\xi)$ будем искать в виде

$$\psi(\xi) = F(\xi) \cdot e^{-\xi^2/2}, \quad (7.79)$$

где $F(\xi)$ – неизвестная функция. Подстановка этого решения в уравнение (7.76) дает уравнение для $F(\xi)$:

$$\frac{d^2 F}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dF}{d\xi} + (\epsilon_0 - 1) \cdot F = 0. \quad (7.80)$$

Решением дифференциального уравнения такого вида являются так называемые полиномы Эрмита:

$$H_n(\xi) = (-1)^n \cdot e^{\xi^2} \cdot \frac{d^n}{d\xi^n} \left(e^{-\xi^2} \right).$$

Дабы не утруждать читателя излишне сложной математикой, приведем последовательный вывод искомого результата. Уравнение (7.80) содержит во втором члене аргумент ξ в качестве множителя при производной. Поэтому оно принципиально отличается от линейных дифференциальных уравнений, описывающих поведение классического осциллятора. Будем искать его решение в виде ряда

$$F(\xi) = \sum_{k=0}^n A_k \xi^k, \quad \text{т.е.} \quad \psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} \sum_{k=0}^n A_k \xi^k, \quad (7.81)$$

где $A_k = \text{const}$. Значение предела суммы n обсудим позже. Читатель может убедиться, что полиномы Эрмита приводят к ряду такого вида.

Подставив $F(\xi)$ из (7.81) в (7.80) и приравнявая коэффициенты при ξ в одинаковых степенях, получим

$$\xi^k \Rightarrow (k+2)(k+1)A_{k+2} - 2kA_k + (\epsilon_0 - 1) \cdot A_k = 0,$$

откуда получаем рекуррентную формулу для коэффициентов A_k

$$A_{k+2} = \frac{2k+1-\epsilon}{(k+2)(k+1)} \cdot A_k. \quad (7.82)$$

Отсюда следует, что все коэффициенты ряда (7.81) определены через две константы – A_0 и A_1 :

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{1-\epsilon_0}{2} \cdot A_0, & A_3 &= \frac{3-\epsilon_0}{6} \cdot A_1, \\ A_4 &= \frac{5-\epsilon_0}{12} \cdot A_2 = \frac{(5-\epsilon_0)(1-\epsilon_0)}{12} \cdot A_0, & A_5 &= \frac{(7-\epsilon_0)(3-\epsilon_0)}{120} \cdot A_1, \\ A_6 &= \frac{9-\epsilon_0}{30} \cdot A_4 = \frac{(9-\epsilon_0)(5-\epsilon_0)(1-\epsilon_0)}{360} \cdot A_0, & A_7 &= \frac{(11-\epsilon_0)(7-\epsilon_0)(3-\epsilon_0)}{5040} \cdot A_1, \\ &\vdots & &\vdots \end{aligned} \quad (7.83)$$

Таким образом, коэффициенты A_k образуют два независимых ряда, каждый из которых определяется через свою константу A_0 или A_1 .

Найдем условие того, что функция (7.79) ограничена при любых ξ . Коэффициенты ряда, как только что выяснилось, убывают с номером k , причем отношение

$$\frac{A_{k+2}}{A_k} = \frac{2k+1-\epsilon_0}{(k+2)(k+1)} \approx \frac{2}{k} \quad \text{при} \quad k \gg 1, \epsilon_0. \quad (7.84)$$

Такое поведение коэффициентов A_k еще не означает, что сумма ряда (7.81) конечна. Действительно, представив экспоненту e^{ξ^2} в виде ряда

$$e^{\xi^2} = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell} (\xi^2)^{\ell} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(\xi^2)^{\ell}}{\ell!}, \quad (7.85)$$

найдем

$$\frac{a_{\ell+2}}{a_{\ell}} = \frac{\ell!}{(\ell+2)!} = \frac{1}{\ell+2} \approx \frac{1}{\ell} \quad \text{при} \quad \ell \gg 1. \quad (7.86)$$

Сравнивая ряды (7.85) и (7.81), видим, что они имеют одинаковый вид, если $2\ell = k$ (ряд (7.85) – разложение по ξ^2). А тогда из (7.86) и (7.84) следует, что соотношение у коэффициентов ряда (7.85) при больших ℓ то же, что и у коэффициентов ряда (7.81), т.е.

$$F(\xi) \rightarrow e^{\psi^2} \quad \text{при} \quad n \rightarrow \infty,$$

и, соответственно, функция (7.81) имеет асимптотику в виде экспоненты от $\xi^2/2$:

$$\psi(\xi) \rightarrow C \cdot e^{\xi^2/2}, \quad \text{если} \quad n \rightarrow \infty,$$

т.е. эта функция неограниченно возрастает при $\xi \rightarrow \infty$. Поэтому единственный выход – оборвать ряд (7.81) на некотором $k = n$, потребовав

$$A_{n+2} = 0, \text{ или } 2n+1 - \varepsilon = 0. \quad (7.87)$$

Отсюда, с учетом обозначений (7.75), находим возможные значения энергии квантового осциллятора (рис. 7.14):

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar\omega_0}{2} \cdot (2n+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.88)$$

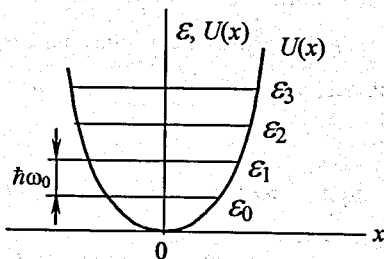


Рис. 7.14. Уровни энергии квантового осциллятора

Уровни энергии квантового осциллятора эквидистантны, т.е. отстоят друг от друга на одно и то же расстояние:

$$\Delta E = \hbar\omega_0. \quad (7.89)$$

И еще одна особенность спектра энергии квантового осциллятора – конечная (не равная нулю) минимально допустимая энергия:

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}. \quad (7.90)$$

Ее, по номеру индекса $n = 0$, называют нулевой энергией квантового осциллятора.

То, что $\varepsilon_0 > 0$, подчеркивает квантовый характер осциллятора – это следствие

соотношения неопределенностей: при $\varepsilon_0 = 0$ ($p_0 = 0$) координата осциллирующей частицы становится неопределенно большой (задача 7.10).

Задача 7.10. Оценить минимально возможную энергию квантового осциллятора, пользуясь соотношением неопределенностей.

Записав энергию осциллятора

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} + \frac{\alpha x^2}{2}$$

и подставив сюда

$$p = \frac{\hbar}{\Delta x} \sim \frac{\hbar}{x},$$

найдем, что минимальное значение $\varepsilon(x)$

$$\varepsilon(x) = \frac{\hbar^2}{2mx^2} + \frac{\alpha x^2}{2}$$

достигается при

$$x = \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{1/4}$$

и равно

$$\varepsilon_{\min} = \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \equiv \hbar\omega_0.$$

Мы получили, что волновые функции квантового осциллятора имеют вид

$$\psi_n(\xi) = C_n \cdot e^{-\xi^2/2} \cdot H_n(\xi), \quad (7.91)$$

где $H_n(\xi)$ – полиномы Эрмита, которые могут быть представлены в виде ряда (7.81) с коэффициентами (7.82), (7.83).

Константы C_n в (7.91) определяют из условия нормировки (6.17).

Задача 7.11. Вычислить волновые функции квантового осциллятора для нулевого и двух первых уровней.

При $n = 0$ ряд (7.61) содержит всего один член – константу A_0 , которую включаем в C_n .

Записав

$$\psi_0(x) = C_0 \cdot e^{-x^2/2x_0^2},$$

из условия нормировки находим (константа A_0 включена в C_0):

$$|C_0|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/x_0^2} dx = \sqrt{\pi} x_0 \cdot |C_0|^2 = 1, \quad |C_0| = \frac{1}{(\sqrt{\pi} x_0)^{1/2}}.$$

При $n=1$ имеем аналогично

$$\varepsilon_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega_0, \quad \psi_1(x) = C_1 \cdot \frac{x}{x_0} \cdot e^{-x^2/2x_0^2}, \quad |C_1| = \frac{\sqrt{2}}{(\sqrt{\pi}x_0)^{1/2}}.$$

При $n=2$

$$\varepsilon_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega_0, \quad \psi_2(x) = \left(A_2 \cdot \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 + A_0 \right) \cdot C_2 \cdot e^{-x^2/2x_0^2} = \left(2 \frac{x^2}{x_0^2} - 1 \right) \cdot C_2 \cdot e^{-x^2/2x_0^2}.$$

Здесь учтены соотношения для A_2 и A_0 (8.63) и константа A_0 включена в C_2 . Из условия нормировки найдем

$$1 = |C_2|^2 \cdot x_0 \int_{-\infty}^{\infty} \{4\xi^4 - 4\xi^2 + 1\} \cdot e^{-\xi^2} d\xi = |C_2|^2 \cdot (3 - 2 + 1) \sqrt{\pi} x_0,$$

$$|C_2| = \frac{1}{(2\sqrt{\pi}x_0)^{1/2}}.$$

Окончательно имеем

$$\begin{aligned} n=0, \quad \varepsilon &= \frac{\hbar \omega_0}{2}, \quad \psi_0(x) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}x_0)^{1/2}} \cdot e^{-x^2/2x_0^2}, \\ n=1, \quad \varepsilon &= \frac{3\hbar \omega_0}{2}, \quad \psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{(\sqrt{\pi}x_0)^{1/2}} \cdot \frac{x}{x_0} \cdot e^{-x^2/2x_0^2}, \\ n=2, \quad \varepsilon &= \frac{5\hbar \omega_0}{2}, \quad \psi_2(x) = \frac{1}{(2\sqrt{\pi}x_0)^{1/2}} \cdot \left(\frac{2x^2}{x_0^2} - 1 \right) \cdot e^{-x^2/2x_0^2}. \end{aligned} \quad (7.92)$$

Поведение $|\psi(x)|^2$ для первых трёх уровней (рис. 7.15) отражает главную особенность волновой функции квантового осциллятора:

$$\begin{aligned} |\psi_0(x)|_{\max}^2 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}x_0} \quad \text{при } x=0, \\ |\psi_1(x)|_{\max}^2 &= \frac{\sqrt{2}}{e \cdot \sqrt{\pi}x_0} \quad \text{при } x = \pm x_0, \\ |\psi_2(x)|_{\max}^2 &= \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}x_0}, & x=0, \\ \frac{1}{e^{3/2}\sqrt{\pi}x_0}, & x = \pm \sqrt{\frac{3}{2}}x_0, \end{cases} \end{aligned}$$

т.е. число максимумов $|\psi(x)|^2$ растет как $n+1$.

Задача 7.12. Электрон совершает малые колебания вблизи центра симметрии системы, состоящей из двух металлических шаров радиусом $R=0,5$ см, помещенных в сильное магнитное поле, направленное вдоль прямой, соединяющей центры шаров (рис. 7.16). Найти расстояние между уровнями энергии такого осциллятора для электрона, колеблющегося строго вдоль этой прямой

(магнитное поле исключает смещение поперёк). Потенциалы обоих шаров $V=100$ кВ, расстояние между их центрами $2r=4$ см.

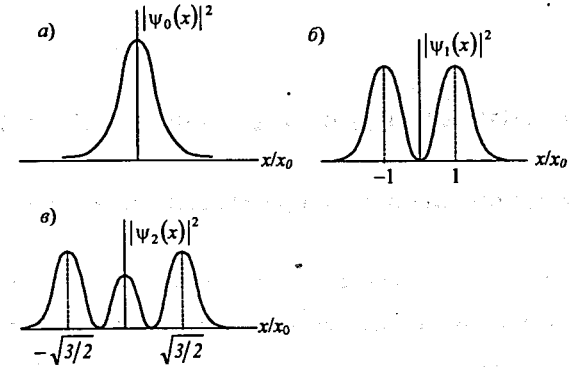


Рис. 7.15. Функции $|\psi_n(x)|^2$ квантового осциллятора для $n=0$ (а), 1 (б) и 2 (в)

Потенциальная энергия электрона в поле шаров равна

$$U(x) = (-e) \cdot VR \cdot \left(\frac{1}{r+x} + \frac{1}{r-x} \right) \cong -eV \cdot \frac{2R}{r} \cdot \left(1 + \frac{x^2}{r^2} \right).$$

Отсюда

$$\alpha = \frac{2eVR}{r}, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{2eV}{mc^2} \cdot \frac{R}{r^3}} \cdot c = \sqrt{\frac{2 \cdot 10^4}{0,51 \cdot 10^6} \cdot \frac{0,5}{8}} \cdot 3 \cdot 10^{10} \approx 1,5 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1} \quad (f_0 \approx 25 \text{ МГц});$$

$$\Delta\varepsilon = \hbar \omega_0 \approx 10^{-7} \text{ эВ}.$$

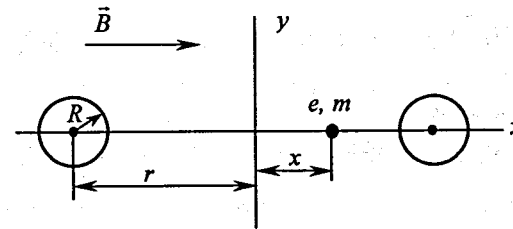


Рис. 7.16. Схема осциллятора (задача 7.12)

Данный пример показывает, что в макроскопических системах квантование (дискретность) уровней энергии осциллятора происходит со столь малым шагом, что этот эффект слабо сказывается на поведении системы – спектр практически непрерывный.

ГЛАВА 8. ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

§ 8.1. Операторы координаты и импульса

Вероятностная интерпретация ψ -функции позволяет развить математический формализм, существенно облегчающий различные квантово-механические вычисления – *метод операторов*.

Начнем с простейшего случая одномерного движения, когда состояние частицы описывается функцией $\psi(x, t)$ и нас интересует среднее значение координаты частицы в момент времени t . В соответствии с определением среднего эта величина есть

$$\langle x \rangle = \int_0^1 x \cdot dP(x) = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot |\psi(x, t)|^2 \cdot dx.$$

Этому выражению можно придать вид

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot x \cdot \psi(x, t) \cdot dx. \quad (8.1)$$

Посмотрим, что получится при таком подходе при вычислении среднего значения импульса. Запишем

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot p \cdot \psi(x, t) \cdot dx. \quad (8.2)$$

В частном случае свободной частицы, когда

$$\psi(x, t) = A \cdot e^{i(px - \epsilon t)/\hbar},$$

справедливо равенство

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p\psi.$$

Поэтому для свободной частицы-волны имеем

$$\langle p_{free} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \psi(x, t) \cdot dx. \quad (8.3)$$

Это своеобразная "подсказка", в каком направлении следует "искать". Действительно, в общем случае волновую функцию $\psi(x, t)$ можно представить в виде суперпозиции монохроматических волн де Бройля – интеграла Фурье (4.19):

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(p) \cdot e^{i(px - \epsilon t)/\hbar} dp. \quad (8.4)$$

Очевидно, что

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(p) \cdot p \cdot e^{i(px - \epsilon t)/\hbar} \cdot dp.$$

Умножим это равенство слева на $\psi^*(x, t)$, записав эту функцию в правой части равенства в виде интеграла Фурье (8.4) (учтя при этом, что экспоненты с $\epsilon t/\hbar$ в показателе взаимно сократятся):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \psi(x, t) \cdot dx &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(p') \cdot e^{-ip'x/\hbar} dp' \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(p'') \cdot e^{ip''x/\hbar} p'' \cdot dp''. \end{aligned}$$

Затем проинтегрируем полученное равенство по x . Очевидно, интеграл по x от произведения экспонент даст, согласно (4.16), $2\pi \cdot \delta(p' - p'')$. Интегрируя далее по p'' , получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \psi \cdot dx = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} p' \cdot |\psi_p(p')|^2 dp'. \quad (8.5)$$

Мы получили сразу два результата. Во-первых, функция $\psi_p(p)$ по смыслу (см. 8.4) есть *вероятностная импульсная функция*, т.е. величина $|\psi_p(p)|^2 \cdot dp$ пропорциональна вероятности обнаружить значение импульса частицы, равное p в интервале δp . Поэтому выражение в правой части (8.5) есть среднее значение

импульса частицы (p). Осталось только разобраться с нормировкой. Оказывается (см. задачу 8.1 ниже), что полная вероятность равна единице, если

$$dP(p) = 2\pi |\psi_p|^2 \cdot dp.$$

Во-вторых, соотношение (8.5) дает способ вычисления среднего значения импульса:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \psi(x, t) \cdot dx. \quad (8.6)$$

Таким образом, данное выражение справедливо в общем случае, а не только для "свободной" частицы.

Задача 8.1. Вычислить нормировочный коэффициент в выражении для вероятности значения импульса

$$dP(p) = C \cdot |\psi_p|^2 \cdot dp.$$

Потребовав выполнения условия нормировки

$$\int dP(p) = 1,$$

подставим в него $\psi_p(p)$, используя обратное фурье-преобразование:

$$\psi_p(p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \cdot e^{-ipx/\hbar} \cdot dx. \quad (8.7)$$

Множитель $e^{ipx/\hbar}$ в последующих выкладках можно опустить, т.к. он не подвергается интегрированию и взаимно сокращается с комплексно-сопряженным ему множителем. Запишем

$$1 = C \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_p|^2 dp = \frac{C}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') e^{-ipx'/\hbar} dx' \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x'') \cdot e^{ipx''/\hbar} dx''.$$

Проинтегрируем по p произведение экспонент. Аналогично тому, как это сделано при выводе (8.5), придём к δ -функции, теперь это $\delta(x' - x'')$. Проинтегрировав затем по x'' , найдем

$$1 = \frac{C}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \frac{C}{2\pi},$$

откуда $C = 2\pi$, и

$$\langle p \rangle = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} p \cdot |\psi_p(p)|^2 \cdot dp. \quad (8.8)$$

Проведенное рассмотрение нетрудно распространить на трёхмерный случай – число интегралов просто утроится.

Проведенный анализ позволяет ввести понятие *квантово-механических операторов*:

$$\text{оператор координаты } \hat{x} = x, \quad (8.9)$$

$$\text{оператор импульса } \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (8.10)$$

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla.$$

В общем случае под оператором \hat{L} понимают некоторый символ, показывающий, каким способом одной функции $\varphi(x)$ сопоставляется другая функция $f(x)$. Это сопоставление записывается в виде умножения \hat{L} на $\varphi(x)$:

$$f(x) = \hat{L}\varphi(x).$$

Оператор, соответствующий некоторой физической величине, обозначается той же буквой, что и сама эта величина, но со "шляпкой" над ней.

Первое применение операторов уже описано выше: для вычисления среднего значения физической величины L нужно подействовать оператором, соответствующим этой величине, на ψ -функцию согласно правилу (8.6):

$$\langle L(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot \hat{L}\psi(x, t) dx. \quad (8.11)$$

Пока мы рассмотрели два случая таких операторов – для координаты и для импульса.

Метод операторов был введен в квантовую механику в период её становления М. Борном и Н. Винером (*M. Born, N. Wiener, 1926 г.*).

§ 8.2. Оператор энергии

Повторяя прием, использованный при "угадывании" выражения для оператора импульса (см. (8.2), (8.3)), без труда найдем выражение для оператора энергии:

$$\hat{\varepsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (8.12)$$

Доказательство его справедливости в общем случае точно повторяет проделанное выше для оператора импульса: в выражениях (8.4), (8.5), (8.8) нужно просто произвести замены $p \rightarrow -\varepsilon$, $x \rightarrow t$. Таким образом,

$$\langle \varepsilon(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \cdot \psi(x, t) dx. \quad (8.13)$$

§ 8.3. Оператор Гамильтона и уравнение Шрёдингера

Используя операторные обозначения, можно записать уравнение Шрёдингера (6.15) в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \cdot \psi, \quad (8.14)$$

где величину

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U \quad (8.15)$$

называют *оператором Гамильтона*, или *гамильтонианом*. Он является квантово-механическим аналогом оператора, введенного в классической механике В. Гамильтоном (*W.R. Hamilton*, 1834 г.). Соответственно, многие вычислительные приемы, развитые в классической механике, переносятся в квантовую, где так называемый *гамильтонов формализм* оказался исключительно плодотворным. Его активное использование выходит за рамки данного курса, и приведенные здесь сведения имеют целью дать читателю некоторые общие представления о методах квантовой механики.

§ 8.4. Собственные функции и собственные значения операторов

Выражения и приемы типа "угадать", "подсказка" и т.п., использованные выше, отнюдь не означают, что нет необходимости в строгом обосновании всего

математического аппарата квантовой механики. Тем не менее изложение, проведенное выше, лучше позволяет почувствовать физическую (природную) основу квантовых явлений и понять логику основателей этой науки. Любопытно, что развитие математического аппарата зачастую шло параллельно с развитием аналогичных разделов в математике, а иногда и опережало последнее. Так обстояло дело, например, с применением интегральных фурье-преобразований, а дельта-функция, введенная Дираком, вообще долгое время не признавалась математиками. И лишь в конце 40-х гг. начали появляться работы, посвящённые строгой математической теории дельта-функции. Впрочем, подобная "история" прослеживается на протяжении всего развития физики и математики, и формализм, к описанию которого мы сейчас перейдем, является результатом исследований, выполненных в *математической физике*.

Выше мы связали среднее значение физических величин x, \bar{p}, ε с некоторым выражением, содержащим результат воздействия на ψ -функцию (см. (8.11)). Аналогично можно пытаться найти выражение, позволяющее определить значение физической величины в состоянии $\psi(\vec{r}, t)$. Например, в задаче 6.3 о частице в ящике при действии оператора импульса (8.10) на волновую функцию частицы (6.21) появляется импульс p_0 :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (\sin p_0 x) = -i\hbar p_0 \cdot \cos p_0 x.$$

Это очередная подсказка. И действительно, развитие математического аппарата привело к появлению понятия *собственных функций* операторов:

$$\hat{L}\Psi = L\Psi. \quad (8.16)$$

Здесь Ψ – так называемая собственная функция оператора \hat{L} , аргумент которой зависит от вида оператора. Вид самой функции в свою очередь зависит от *начальных* и *граничных* условий. Так, в задаче 6.3 использованы граничные условия на стенках ящика (6.20).

Параметр L , который находим, решая уравнение (8.16), называется *собственным значением оператора* \hat{L} . Соответственно, уравнение (8.16) называют *уравнением на собственные значения оператора* \hat{L} . В задаче 6.3 мы

получили набор собственных значений (6.22) оператора импульса частицы в ящике:

$$p_0^{(n)} = n \frac{\pi \hbar}{a}. \quad (8.17)$$

Важным свойством собственных функций является их ортонормированность:

$$\int_a^b \psi_n^*(x) \cdot \psi_m(x) dx = \delta_{mn}, \quad (8.18)$$

где $\{a, b\}$ – интервал, на котором определены функции, δ_{mn} – символ Кронекера (*L. Kronecker*, ок. 1860 г.):

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 1, & m = n. \end{cases} \quad (8.19)$$

Нетрудно проверить, что ψ -функция (6.23) удовлетворяет условию (8.18):

$$\frac{a}{2} \int_0^a \sin \frac{n\pi x}{a} \cdot \sin \frac{m\pi x}{a} \cdot dx = -\frac{1}{\pi} \cdot \left[\frac{\sin(n+m)\xi}{n+m} + \frac{\sin(n-m)\xi}{n-m} \right]_{\xi=0}^{\xi=\pi} = \delta_{mn}.$$

Свойство ортонормированности имеет вполне определенный физический смысл. Равенство нулю интеграла (8.18) при $n \neq m$, называемое *ортгональностью* функций на отрезке $\{a, b\}$, означает *независимость* состояний m и n , а равенство этого интеграла единице при $n = m$ есть не что иное, как условие нормировки (6.17). Мы ограничимся здесь одномерным случаем.

Принято также говорить, что решение задачи на собственные значения оператора (или уравнения Шрёдингера) в виде функций $\psi(\vec{r}, t)$ является представлением в *пространстве координат*, а решение в форме фурье-образов $\psi_p(\vec{p})$ (8.6) – представлением в *импульсном пространстве*.

Математическое выражение принципа суперпозиции есть разложение любого частного решения уравнения Шрёдингера по собственным функциям оператора Гамильтона (в котором потенциал $U(\vec{r})$ задан условиями конкретной задачи). Из принципа суперпозиции следует свойство линейности квантово-механических операторов:

$$\hat{L}(C_1\phi_1 + C_2\phi_2) = \hat{L}C_1\phi_1 + \hat{L}C_2\phi_2 = C_1\hat{L}\phi_1 + C_2\hat{L}\phi_2, \quad (8.20)$$

где ϕ_1 и ϕ_2 – произвольные функции, C_1 и C_2 – произвольные постоянные (постоянные числа могут выноситься из-под знака действия оператора). Другое важное свойство операторов следует из того факта, что среднее значение любой физической величины L является вещественным числом:

$$\langle L \rangle = \langle L \rangle^*. \quad (8.21)$$

Записав выражения для средних значений через интеграл от волновой функции

$$\langle L(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot \hat{L}\psi(x, t) dx$$

и вычислив комплексно-сопряжённое значение

$$\langle L(t) \rangle^* = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot \hat{L}\psi(x, t) dx \right)^* = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) \hat{L}^* \psi^*(x, t) dx,$$

из равенства (8.21) находим

$$\int \psi^* \hat{L}\psi dx = \int \psi \hat{L}^* \psi^* dx.$$

Операторы, удовлетворяющие равенству для произвольных функций ϕ_1, ϕ_2 , называются *самосопряженными*, или *эрмитовыми*:

$$\int \phi_1^* \hat{L}\phi_2 dx = \int \phi_2 \hat{L}^* \phi_1^* dx. \quad (8.22)$$

Задача 8.2. Показать, что собственные функции самосопряженного оператора являются ортогональными.

Пусть ψ_n и ψ_m – две различные собственные функции самосопряженного оператора \hat{L} , тогда они удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\hat{L}\psi_n = L_n\psi_n \quad \text{и} \quad \hat{L}\psi_m = L_m\psi_m, \quad (8.23)$$

где L_n и L_m – различные вещественные числа. Получим из первого уравнения его комплексно-сопряженное:

$$\hat{L}^*\psi_n^* = L_n\psi_n^*. \quad (8.24)$$

Умножим второе уравнение (8.23) слева на ψ_n^* и вычтем из него уравнение (8.24), умноженное слева на ψ_m :

$$\psi_n^* \hat{L}\psi_m - \psi_m \hat{L}^*\psi_n^* = (L_m - L_n) \cdot \psi_n^* \psi_m.$$

Проинтегрировав обе части этого уравнения по всей области изменения переменных, получим

$$\int \psi_n^* \hat{L} \psi_m dx - \int \psi_m \hat{L} \psi_n^* dx = (L_m - L_n) \cdot \int \psi_n^* \psi_m dx. \quad (8.25)$$

В силу самосопряженности оператора левая часть (8.25) равна нулю, следовательно

$$(L_m - L_n) \cdot \int \psi_n^* \psi_m dx = 0,$$

откуда из условия $L_n \neq L_m$ следует ортогональность ψ_n и ψ_m .

Задача 8.3. Определить среднее значение физической величины, описываемой самосопряженным оператором \hat{L} , в состоянии с волновой функцией, заданной в виде

$$\psi = \sum_{k=1}^N C_k \psi_k, \quad (8.26)$$

где ψ_k – собственные функции оператора \hat{L} .

Выражение (8.26) представляет собой разложение волновой функции в ряд по собственным функциям оператора \hat{L} . Для произвольной функции ψ выражения для коэффициентов разложения могут быть получены умножением левой и правой части (8.26) на собственную функцию ψ_l^* с последующим интегрированием по всей области определения волновой функции:

$$\int \psi_l^* \psi dV = \int \psi_l^* \sum_{k=1}^N C_k \psi_k dV = \sum_{k=1}^N C_k \int \psi_l^* \psi_k dV.$$

В силу ортонормированности собственных функций самосопряженного оператора все интегралы в правой части этого равенства обращаются в нуль, кроме одного, у которого $k=l$. В результате имеем

$$C_l = \int \psi_l^* \psi dV. \quad (8.27)$$

Среднее значение величины L находим по определению

$$\langle L \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dV = \int \sum_i C_i^* \psi_i^* \sum_j C_j L_j \psi_j dV,$$

где L_j – соответствующие собственные числа. Поменяв местами порядок суммирования и интегрирования, получим

$$\langle L \rangle = \sum_i \sum_j C_i^* C_j L_j \int \psi_i^* \psi_j dV = \sum_i |C_i|^2 L_i,$$

где последнее равенство следует из свойства ортонормированности собственных функций. Отсюда становится понятен физический смысл коэффициентов C_k , определяемых выражением (8.27): $|C_k|^2$ – это вероятность того, что при измерении величины L мы получим значение, равное L_k .

§ 8.5. Коммутатор операторов и соотношения неопределенностей

При измерении некоторой физической характеристики квантово-механической системы можно получить лишь значение, являющееся одним из собственных значений соответствующего оператора. В случае, когда система находится в состоянии с волновой функцией, совпадающей с одной из собственных функций оператора измеряемой величины, и это состояние не вырождено (т.е. данной собственной функции соответствует единственное собственное значение), измерение может быть проведено со сколь угодно высокой точностью. Принято говорить, что при этом измеряемая величина имеет определенное значение. При измерении двух и более величин каждая из них может иметь определенное значение, если волновая функция системы является одновременно собственной функцией операторов соответствующих величин. Например, для двух величин L и M волновая функция должна одновременно удовлетворять двум уравнениям:

$$\begin{aligned} \hat{L}\Psi &= L\Psi, \\ \hat{M}\Psi &= M\Psi, \end{aligned} \quad (8.28)$$

где L и M – некоторые собственные числа. Тогда в силу линейности операторов выполняются и следующие равенства:

$$\begin{aligned} \hat{M}(\hat{L}\Psi) &= \hat{M}(L\Psi) = L\hat{M}\Psi = LM\Psi, \\ \hat{L}(\hat{M}\Psi) &= \hat{L}(M\Psi) = M\hat{L}\Psi = ML\Psi, \end{aligned}$$

откуда следует

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\Psi = 0. \quad (8.29)$$

Оператор $(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})$ называется *квантово-механической скобкой Пуассона* или *коммутатором* операторов \hat{M} и \hat{L} и обозначается

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M}) \equiv [\hat{M}, \hat{L}]. \quad (8.30)$$

Операторы, коммутатор которых равен нулю, называются *коммутирующими*.

Таким образом, две физические величины могут быть одновременно точно измерены только в том случае, если соответствующие им операторы

коммутируют друг с другом. Этот результат позволяет сформулировать обобщённые соотношения неопределенностей для любых пар физических характеристик квантово-механической системы, которое принято записывать в следующей форме:

$$\Delta M \cdot \Delta L \geq \frac{|\langle [\hat{M}, \hat{L}] \rangle|}{2}. \quad (8.31)$$

Строгий вывод и детальный анализ этого соотношения выходит за рамки данного курса.

Задача 8.4. Определить коммутатор операторов координаты и соответствующей проекции импульса.

В выражение для коммутатора (8.30) подставим выражения (8.9), (8.10) и подействуем им на некоторую волновую функцию:

$$\left(-i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x\right)\Psi = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \Psi + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\Psi) = i\hbar \Psi,$$

откуда получаем

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar.$$

Аналогично для других проекций. Следовательно, операторы координаты и соответствующей проекции импульса не коммутируют, это означает, что соответствующие физические величины не могут одновременно иметь определенные значения. Обратим внимание, что, подставив полученное значение коммутатора в (8.31), получим следующее соотношение для неопределенностей координаты и импульса:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2},$$

которое отличается от соотношения (5.3) множителем 1/2. Ввиду нестрогого знака неравенства наличие числового множителя порядка единицы не играет существенной роли при оценках по порядку величины. В самом общем виде соотношение неопределенностей для координаты и импульса можно записать в виде $\Delta p \cdot \Delta x \geq \gamma \hbar$, где числовой множитель γ определяется конкретным видом огибающей волнового пакета. Для волнового пакета с гауссовой огибающей этот числовой множитель минимален и достигает значения 1/2. Однако впервые соотношение неопределенностей было сформулировано Гейзенбергом в 1927 г. именно в форме (5.3), и в такой форме оно приводится в большинстве учебников по квантовой механике.

Задача 8.5. Показать, что среднее значение физической величины совпадает с собственным значением соответствующего оператора, если волновая функция системы совпадает с одной из собственных функций этого оператора.

Умножив обе части равенства (8.16) слева на $\psi^*(x, t)$ и проинтегрировав по x , найдем

$$\langle L(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot \hat{L} \cdot \psi(x, t) dx = L \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = L. \quad (8.32)$$

Этот результат без труда распространяется и на трёхмерный случай. Таким образом, среднее значение физической величины, которой соответствует оператор \hat{L} , в состоянии, описываемом собственной функцией этого оператора $\psi(\vec{r}, t)$, совпадает с собственным значением оператора, соответствующим этой собственной функции.

§ 8.6. Производные операторов по времени

В ряде задач квантовой механики, где требуется определить производную по времени какой-либо величины, удобно воспользоваться значением производной по времени квантово-механического оператора, соответствующего этой физической величине. Найдём такое значение для вектора оператора \hat{L} (наиболее общий случай) из соотношения (8.32), связывающего оператор с его собственным значением. Дифференцируя (8.32) по времени, получаем

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \cdot \hat{L} \cdot \psi + \psi^* \cdot \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \cdot \psi + \psi \hat{L}^* \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] \cdot dV,$$

$$\psi = \psi(\vec{r}, t).$$

Интеграл от второго слагаемого в скобках даёт среднее значение частной производной по времени величины \bar{L} :

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial t} = \int \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \cdot \psi \cdot dV.$$

Эта производная равна нулю, если \bar{L} явно не зависит от времени.

Производные волновых функций запишем, воспользовавшись уравнением Шрёдингера в форме (8.14):

$$\dot{\hat{L}} \equiv \frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int \left[(\hat{H}^* \psi^*) \cdot \left(\hat{L} \psi \right) - \psi^* \hat{L} \hat{H} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi \right] \cdot dV. \quad (8.33)$$

Круглыми скобками обозначено, на какую из функций действует оператор в скобках.

Прежде чем продвигаться дальше в анализе полученного выражения, выясним важное свойство оператора Гамильтона. Дифференцируя условие ортонормированности волновых функций (8.18) по времени и подставляя опять значения производной ψ -функции из уравнения Шрёдингера, найдём

$$0 = \frac{d}{dt} \int \psi_n^* \psi_m dV = \int \left[\frac{\partial \psi_n^*}{\partial t} \cdot \psi_m + \psi_n^* \frac{\partial \psi_m}{\partial t} \right] \cdot dV = \frac{i}{\hbar} \int \left[(\hat{H}^* \psi_n^*) \cdot \psi_m - \psi_n^* (\hat{H} \psi_m) \right] \cdot dV.$$

Учитывая, что в первом слагаемом оператор \hat{H}^* действует только на ψ_n^* , но не на ψ_m , переставим сомножители и, сократив общий множитель i/\hbar , получим

$$\int \psi_m \hat{H}^* \psi_n^* dV - \int \psi_n^* \hat{H} \psi_m dV = 0,$$

или

$$\int \psi_m^* \hat{H} \psi_n dV = \int \psi_n \hat{H}^* \psi_m^* dV. \quad (8.34)$$

Сравнив этот результат с условием (8.22), видим, что оператор Гамильтона является самосопряжённым, или эрмитовым. Используя полученное свойство оператора Гамильтона, преобразуем выражение (8.33). При этом учтём, что функцию $\hat{L} \psi$ можно рассматривать как какую-то иную функцию, которая может "играть роль" функции ψ_n в условии эрмитовости (8.34). Тогда первое слагаемое в (8.33) можно преобразовать:

$$\int (\hat{H}^* \psi^*) \cdot \hat{L} \psi \cdot dV = \int (\hat{L} \psi) \cdot (\hat{H}^* \psi^*) \cdot dV = \int \psi^* (\hat{H} \hat{L} \psi) \cdot dV.$$

В последнем равенстве как раз и использовано условие (8.28). Подставив этот результат в (8.33), находим

$$\dot{\hat{L}} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \cdot \left[\hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H} \right] \cdot \psi \cdot dV + \int \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \cdot \psi \cdot dV. \quad (8.35)$$

Мы получили выражение, которое по форме совпадает со средним значением некоторой физической величины (сравни с (8.32)). Этой физической величине соответствует оператор, заданный выражением в скобках в (8.35). Кроме того, согласно (8.32), если физическая величина имеет определенное значение, то среднее значение соответствующего оператора равно его собственному значению. Поэтому

$$\dot{\hat{L}} = \langle \dot{\hat{L}} \rangle.$$

Отсюда можно заключить, что $\left(\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \right)$ – оператор производной оператора \hat{L} по времени описывается выражением в скобках в (8.35). А нас интересует не "оператор производной", а "производная оператора"! Но в квантовой механике определённое значение, как мы знаем, имеют только средние величины. Поэтому естественно принять, что для любой квантово-механической величины имеет место равенство

$$\left\langle \frac{d\hat{L}}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{L} \rangle \quad (8.36)$$

(см. также [2], § 9). Таким образом, мы пришли к выводу, что как среднее значение производной от \hat{L} , так и производная от среднего значения \hat{L} описываются одним и тем же оператором

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left\{ \hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H} \right\}. \quad (8.37)$$

Второе слагаемое в этом выражении – коммутатор операторов \hat{H} и \hat{L} .

Задача 8.6. Определить производные по времени операторов координаты и соответствующей проекции импульса.

Ввиду того, что операторы координаты и проекции импульса не зависят явно от времени, операторы их производных имеют вид

$$\dot{\hat{L}} \equiv \frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int \left[(\hat{H}^* \psi^*) \cdot \left(\hat{L} \psi \right) - \psi^* \hat{L} \hat{H} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi \right] \cdot dV. \quad (8.33)$$

Круглыми скобками обозначено, на какую из функций действует оператор в скобках.

Прежде чем продвигаться дальше в анализе полученного выражения, выясним важное свойство оператора Гамильтона. Дифференцируя условие ортонормированности волновых функций (8.18) по времени и подставляя опять значения производной ψ -функции из уравнения Шрёдингера, найдём

$$0 = \frac{d}{dt} \int \psi_n^* \psi_m dV = \int \left[\frac{\partial \psi_n^*}{\partial t} \cdot \psi_m + \psi_n^* \frac{\partial \psi_m}{\partial t} \right] \cdot dV = \frac{i}{\hbar} \int \left[(\hat{H}^* \psi_n^*) \cdot \psi_m - \psi_n^* (\hat{H} \psi_m) \right] \cdot dV.$$

Учитывая, что в первом слагаемом оператор \hat{H}^* действует только на ψ_n^* , но не на ψ_m , переставим сомножители и, сократив общий множитель i/\hbar , получим

$$\int \psi_m \hat{H}^* \psi_n^* dV - \int \psi_n^* \hat{H} \psi_m dV = 0,$$

или

$$\int \psi_m^* \hat{H} \psi_n dV = \int \psi_n \hat{H}^* \psi_m^* dV. \quad (8.34)$$

Сравнив этот результат с условием (8.22), видим, что оператор Гамильтона является самосопряжённым, или эрмитовым. Используя полученное свойство оператора Гамильтона, преобразуем выражение (8.33). При этом учтём, что функцию $\hat{L} \psi$ можно рассматривать как какую-то иную функцию, которая может "играть роль" функции ψ_n в условии эрмитовости (8.34). Тогда первое слагаемое в (8.33) можно преобразовать:

$$\int (\hat{H}^* \psi^*) \cdot \hat{L} \psi \cdot dV = \int (\hat{L} \psi) \cdot (\hat{H}^* \psi^*) \cdot dV = \int \psi^* (\hat{H} \hat{L} \psi) \cdot dV.$$

В последнем равенстве как раз и использовано условие (8.28). Подставив этот результат в (8.33), находим

$$\dot{\hat{L}} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \cdot \left[\hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H} \right] \cdot \psi \cdot dV + \int \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \cdot \psi \cdot dV. \quad (8.35)$$

Мы получили выражение, которое по форме совпадает со средним значением некоторой физической величины (сравни с (8.32)). Этой физической величине соответствует оператор, заданный выражением в скобках в (8.35). Кроме того, согласно (8.32), если физическая величина имеет определенное значение, то среднее значение соответствующего оператора равно его собственному значению. Поэтому

$$\dot{\hat{L}} = \langle \dot{\hat{L}} \rangle.$$

Отсюда можно заключить, что $\left(\frac{\dot{\hat{L}}}{\hbar} \right)$ — оператор производной оператора \hat{L} по времени описывается выражением в скобках в (8.35). А нас интересует не "оператор производной", а "производная оператора"! Но в квантовой механике определённое значение, как мы знаем, имеют только средние величины. Поэтому естественно принять, что для любой квантово-механической величины имеет место равенство

$$\left\langle \frac{d\bar{L}}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle \bar{L} \rangle \quad (8.36)$$

(см. также [2], § 9). Таким образом, мы пришли к выводу, что как среднее значение производной от \bar{L} , так и производная от среднего значения \bar{L} описываются одним и тем же оператором

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left\{ \hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H} \right\}. \quad (8.37)$$

Второе слагаемое в этом выражении — коммутатор операторов \hat{H} и \hat{L} .

Задача 8.6. Определить производные по времени операторов координаты и соответствующей проекции импульса.

Ввиду того, что операторы координаты и проекции импульса не зависят явно от времени, операторы их производных имеют вид

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}], \\ \frac{d\hat{p}_x}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_x],\end{aligned}\quad (8.38)$$

Распишем коммутатор операторов Гамильтона и координаты:

$$[\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot x + Ux + x \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} - xU$$

и с учетом того, что $\frac{\partial^2}{\partial x^2} x = x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial}{\partial x}$, получим

$$[\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x},$$

что после подстановки в (8.38) дает

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{m}. \quad (8.39)$$

Аналогично для производной проекции импульса можно получить

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x}. \quad (8.40)$$

Для средних значений координаты и проекции импульса можно записать следующие уравнения:

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle &= \left\langle \frac{p_x}{m} \right\rangle, \\ \left\langle \frac{dp_x}{dt} \right\rangle &= -\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle.\end{aligned}$$

По форме они совпадают с классическими уравнениями движения частицы в потенциальном поле U . Это совпадение не случайно: выражения (8.39), (8.40) являются частными случаями *теоремы Эренфеста* (P. Ehrenfest, 1927 г.), согласно которой средние значения квантовомеханических величин подчиняются законам классической механики.

Формализм, изложенный в этом параграфе, будет использован ниже в анализе различных физических ситуаций.

ГЛАВА 9. СИММЕТРИИ В ПРИРОДЕ

§ 9.1. Операция инверсии и симметрия волновой функции

Операцией инверсии координатной системы, или пространственного (зеркального) отражения, называют преобразование

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}, \quad x \rightarrow -x, \quad y \rightarrow -y, \quad z \rightarrow -z. \quad (9.1)$$

При этом каждая координата точки пространства меняет знак, т.е. претерпевает зеркальное отражение (рис. 9.1). Поведение волновой функции при такой операции характеризует одно из фундаментальных свойств квантовой системы, которую эта волновая функция описывает – её *свойство симметрии*. Из самых общих соображений можно указать два класса волновых функций ("третьего не дано"):

$$\begin{aligned}\text{симметричные,} \quad \psi(\vec{r}) &= \psi(-\vec{r}), \\ \text{антисимметричные,} \quad \psi(\vec{r}) &= -\psi(-\vec{r}).\end{aligned}\quad (9.2)$$

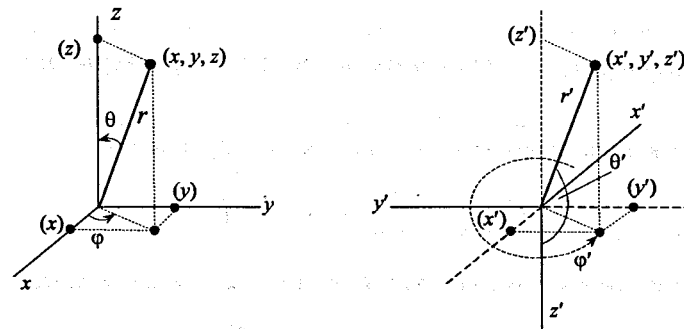


Рис. 9.1. Изменение координат при операции инверсии (пространственного отражения):

$$\begin{aligned}x' &= -x, \quad y' = -y, \quad z' = -z, \\ r' &= r, \quad \theta' = \pi - \theta, \quad \phi' = \pi + \phi\end{aligned}\quad (9.3)$$

§ 9.2. Оператор инверсии

Можно ввести оператор, производящий операцию инверсии. Его принято обозначать буквой \hat{P} (от англ. *parity* – четность). По определению

$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = P\psi(-\vec{r}), \quad (9.4)$$

где P – собственное значение оператора инверсии. Нетрудно сообразить, что

$$\psi(\vec{r}) \equiv \hat{P}(\hat{P}\psi(\vec{r})),$$

что в свою очередь дает

$$\hat{P}(\hat{P}\psi(\vec{r})) = \hat{P}(P\psi(-\vec{r})) = P(\hat{P}\psi(-\vec{r})) = P^2\psi(\vec{r}).$$

Таким образом,

$$P^2 = 1, \quad P = \pm 1. \quad (9.5)$$

Физический смысл этого результата почти очевиден (см. (9.2)):

$$\begin{aligned} P = +1 & \text{ для симметричных функций,} \\ P = -1 & \text{ для антисимметричных функций.} \end{aligned} \quad (9.6)$$

Соответственно, симметричные функции принято называть *четными*, а антисимметричные – *нечетными*.

§ 9.3. Закон сохранения чётности и его нарушение

Действие оператора чётности на уравнение Шрёдингера

$$\hat{P} \left| i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \cdot \psi \right. \quad (9.7)$$

приводящее к инверсии знака координат, не изменяет знака лапласиана:

$$\hat{P} \Rightarrow \vec{r} \rightarrow -\vec{r}, \quad \hat{P} \cdot \Delta_r = \hat{P} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} = \Delta_{-r}.$$

Соответственно, уравнение принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi(-\vec{r})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(-\vec{r}, t) + U(-\vec{r}) \cdot \psi(-\vec{r}, t). \quad (9.8)$$

Если функция потенциальной энергии симметрична, т.е. $U(\vec{r}) = U(-\vec{r})$, то, как

видно из (9.7) и (9.8), волновые функции $\psi(\vec{r}, t)$ и $\psi(-\vec{r}, t)$ подчиняются одному и тому же уравнению. Поэтому, если, например, при $t = 0$ система, описываемая ψ -функцией, симметрична, т.е.

$$\psi(\vec{r}, 0) = \psi(-\vec{r}, 0),$$

то эта симметричность сохраняется со временем:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(-\vec{r}, t). \quad (9.9)$$

Если же $U(\vec{r}) \neq U(-\vec{r})$, состояние начальной симметрии, вообще говоря, не сохраняется со временем.

В качестве примера системы с разными чётностями состояний можно привести квантовый осциллятор (§ 7.7). У него

$$\begin{aligned} P = +1 & \text{ для четных } n, \\ P = -1 & \text{ для нечетных } n. \end{aligned}$$

Это отчетливо видно на волновых функциях трёх нижних состояний квантового осциллятора (7.92). Собственное значение оператора P для данного состояния квантовой системы называют также *чётностью*, или *пространственной чётностью*, состояния. В приведённом примере осциллятора состояния с чётным n – чётные, и наоборот.

Следствием закона сохранения чётности является определённая структура волновой функции: если чётность сохраняется и имеет определённое значение (+1 или -1), то операция инверсии не меняет квадрата модуля волновой функции, т.е.

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(-\vec{r}, t)|^2. \quad (9.10)$$

А это означает, что функция $\psi(\vec{r}, t)$, представленная в виде ряда по степеням x , y , z , не должна содержать координаты и их произведения в нечётных степенях:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{k, \ell, m=1}^{\infty} a_{k\ell m} x^k y^\ell z^m, \quad k, \ell, m = 2n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Записанная в сферических координатах, эта функция не должна содержать $\cos\theta$ в нечётной степени, т.к. операция инверсии (9.3) переводит θ в $\pi - \theta$ и слагаемое $\cos\theta$ меняет знак: $\cos(\pi - \theta) = -\cos\theta$.

Поэтому равенство (9.10) удовлетворяется в случае угловой зависимости ψ -функции вида

$$\psi(\theta) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (\cos\theta)^{2i},$$

в то время как для ψ -функции вида

$$\psi(\theta) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (\cos\theta)^{2i+1} \quad (9.11)$$

равенство (9.10) нарушается. Закон сохранения чётности является одним из фундаментальных в физике. Он оставался незыблемым до 1956 г., когда появились экспериментальные указания на его нарушение.

И первое из таких указаний было получено при исследовании свойств K -мезонов, которые могут распадаться по разным схемам (разный набор частиц – продуктов распада). При этом в одних схемах K -мезоны ведут себя как чётные частицы, а в других – как нечётные. До этого времени считалось, что β -распад прекрасно описывается теорией, созданной Ферми (*E. Fermi*, 1934 г.), который ввёл понятие слабого взаимодействия. Теория Ферми предполагает справедливость закона сохранения чётности. Однако в 1956 г. американские физики Ли Цзундао (*Lee Tsung-Dao*) и Янг Дженънин (*Yang Chen-Ning*), анализируя результаты экспериментов с K -мезонами, показали, что можно построить "параллельную" теорию β -распада, в которой закон сохранения чётности не используется, т.е. допускается его нарушение. Новая теория разрешила проблему K -мезонов и дала хорошее согласие с экспериментом. Соответственно, выдвинутое Ли и Янгом предположение о нарушении закона сохранения чётности в слабых взаимодействиях, в том числе и в β -распаде ядер, не противоречило экспериментальным данным, известным к тому времени.

Прямой проверкой гипотезы Ли и Янга был эксперимент, поставленный в 1957 г. группой американских физиков во главе с Ву Цзяньсюн (*Wu Chien-Shing*). В эксперименте измерялась угловая зависимость интенсивности электронов, испускаемых β -активным изотопом ^{60}Co , ядра которого поляризованы во внешнем поле.

Поляризация ядер означает, что собственный механический момент (спин – см. гл. 11 ниже) каждого из них ориентирован преимущественно вдоль некоторого выделенного направления. В данном случае это направление внешнего магнитного поля.

Как известно из классической электродинамики, частица с магнитным моментом $\vec{\mu}$ в магнитном поле \vec{B} обретает потенциальную энергию, зависящую от значения угла θ между векторами $\vec{\mu}$ и \vec{B} :

$$U = -(\vec{\mu}, \vec{B}) = -\mu B \cdot \cos\theta. \quad (9.12)$$

Распределение векторов $\vec{\mu}$ по углу θ устанавливается в соответствии с законом Больцмана (задача 9.1 ниже):

$$\frac{dN(\theta)}{d\Omega} = \frac{N_0}{4\pi} \frac{\alpha}{\text{sh}\alpha} e^{\alpha \cos\theta}, \quad \alpha = \frac{\mu B}{T}, \quad (9.13)$$

где N_0 – число частиц, $d\Omega$ – элемент телесного угла, T – температура частиц. Отсюда легко видеть, что степень поляризации вещества в магнитном поле – отношение числа частиц, ориентированных по полю ($\theta = 0$), к числу частиц, ориентированных против поля ($\theta = \pi$), – определяется параметром α :

$$\frac{\Delta N^+}{\Delta N^-} = e^{2\alpha}.$$

Очевидно, для достижения высокой степени поляризации требуется $\alpha \sim 1$.

Для атомов парамагнитного вещества магнитный момент их электронной оболочки имеет величину порядка магнетона Бора (§ 11.3):

$$\mu \sim 6 \cdot 10^{-5} \text{ эВ/Тл},$$

так что в поле $B = 1$ Тл (10^4 Гс) и при температуре $T = 1$ К^{*)} параметр α близок к единице:

$$\alpha \approx 0,6.$$

Таким образом, для поляризации атомов парамагнетика требуются низкие температуры.

Ещё сложнее дело обстоит с поляризацией ядер, магнитные моменты которых на три порядка меньше. Здесь на помощь приходит магнитное поле электронной оболочки, которое в центре парамагнитного атома с моментом μ составляет (поле магнитного диполя)

$$B_e \sim \frac{\mu}{a^3} \sim 10 \text{ Тл},$$

где $a \sim 0,5 \cdot 10^{-8}$ см – размер атома. Это поле и "выстраивает" магнитные моменты ядер параллельно магнитным моментам электронной оболочки.

Для достижения низкой температуры парамагнитного образца применяют метод адиабатического размагничивания или "магнитного охлаждения". Этот метод, предложенный в

^{*)} Напомним, что $1 \text{ эВ} \approx 11000 \text{ К}$.

1926 г. П. Дебаем и У. Джиоком (*P. Debye, W. Giaque*), хорошо развит в физике низких температур. Метод основан на использовании всё того же взаимодействия атомов парамагнитного вещества с внешним магнитным полем. Помещённый в магнитное поле образец парамагнетика охлаждают до температуры около 1 К, предельно достижимой при использовании жидкого гелия. Температура сжижения гелия составляет 4,2 К при нормальном давлении. При его испарении в вакуум достигается дополнительное охлаждение. Охлаждённый таким способом газ гелия выпускают в сосуд Дьюара, где находится охлаждаемый образец. Так это делалось в описываемом эксперименте группы Ву (рис. 9.2). В образце устанавливается распределение векторов $\vec{\mu}$ по углу θ в соответствии с законом (9.13). Образец термоизолируют – откачивают газ из сосуда Дьюара с образцом. Затем магнитное поле снижают на некоторую величину ΔB . Можно показать (задача 9.2 ниже), что суммарная потенциальная энергия атомов при этом увеличивается. Поскольку образец термоизолирован, т.е. тепло извне не поступает (отсюда и название – *адиабатическое* размагничивание), то уменьшается суммарная кинетическая энергия атомов образца, т.е. снижается его температура. Таким образом, парамагнетик совершает работу по собственному размагничиванию. Далее операция повторяется ещё и ещё раз, пока не достигается желаемая температура. После каждого "шага по полю" образец выдерживается некоторое время при новом значении поля, чтобы установилось распределение (9.13), соответствующее новой температуре.

Задача 9.1. Показать, что в магнитном поле устанавливается распределение (9.13) атомов парамагнетика по углам θ .

Распределение Больцмана для энергии $U(\theta)$ (9.12), очевидно, имеет вид

$$\frac{dN(\theta)}{d\Omega} = C \cdot e^{-U(\theta)/T} = C \cdot e^{\alpha \cos\theta}.$$

Нормировочный множитель C найдём из условия

$$N_0 = \int_{\Omega} \frac{dN(\theta)}{d\Omega} \cdot d\Omega = C \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin\theta \cdot d\theta \cdot e^{\alpha \cos\theta},$$

что даёт

$$C = \frac{N_0}{4\pi} \cdot \frac{\alpha}{\text{sh}\alpha}.$$

Тем самым приходим к формуле (9.13).

Задача 9.2. Вычислить изменение внутренней энергии термоизолированного образца парамагнетика, находящегося во внешнем магнитном поле \vec{B} при температуре T , при изменении поля на величину ΔB .

Суммарная потенциальная энергия N_0 атомов (внутренняя энергия образца) в поле B есть

$$\begin{aligned} U_N &= \int_{\Omega} U(\theta) \cdot \frac{dN(\theta)}{d\Omega} \cdot d\Omega = (-\mu B) \cdot \frac{N_0}{4\pi} \cdot \frac{\alpha}{\text{sh}\alpha} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin\theta \cdot d\theta \cdot e^{\alpha \cos\theta} = \\ &= -\frac{N_0 T}{2 \cdot \text{sh}\alpha} \cdot \int_{-\alpha}^{\alpha} x \cdot e^x dx = N_0 T (1 - \alpha \cdot \text{cth}\alpha). \end{aligned} \quad (9.14)$$

Отсюда найдём

$$\Delta U_N = \frac{dU_N}{d\alpha} \cdot \frac{d\alpha}{dB} \cdot \Delta B = N_0 \frac{\alpha - \frac{\text{sh}2\alpha}{2}}{\text{sh}^2\alpha} \cdot \mu \cdot \Delta B. \quad (9.15)$$

Результат (9.15) этой задачи показывает, что приращение внутренней энергии при снижении поля (т.е. при $\Delta B < 0$) положительно, если

$$\alpha - \frac{\text{sh}2\alpha}{2} < 0,$$

что выполняется при любых α . В частности,

$$\Delta U_N = \begin{cases} -\frac{2}{3} N_0 \cdot \alpha \cdot \mu \cdot \Delta B, & \alpha \ll 1, \\ -N_0 \cdot \text{cth}\alpha \cdot \mu \cdot \Delta B, & \alpha \gg 1. \end{cases}$$

Отсюда следует, что изменение U_N увеличивается с ростом α , т.е. с уменьшением температуры. Поэтому для повышения скорости охлаждения образца при адиабатическом размагничивании (задача 9.3) и требуется как можно более низкая его начальная температура.

Задача 9.3. Оценить скорость охлаждения парамагнетика при адиабатическом размагничивании при $T \sim 1$ К в поле $B = 1$ Тл.

В соответствии с приведённой выше оценкой значение α составляет примерно 0,6 при таких параметрах эксперимента. Тогда из (9.15) находим

$$\frac{\Delta T}{\Delta B} = \frac{(-\Delta U_N)}{N_0 \cdot \Delta B} = -\frac{\alpha - \frac{\text{sh}2\alpha}{2}}{\text{sh}^2\alpha} \approx 2,5 \cdot 10^{-5} \text{ К/Гс}.$$

Отсюда следует, что при снижении поля с шагом $\Delta B = 100$ Гс от 1 К до 1 мК требуется порядка 400 "шагов" по полю.

Методом адиабатического размагничивания в настоящее время получают рекордно низкие температуры, ниже 1 мК.

Заметим, что приведённое описание метода магнитного охлаждения дано на языке классической физики. Ниже (§ 11.6) мы увидим, что квантовый подход существенно не изменяет полученные результаты (сравни формулу (9.12) и формулу для \mathcal{E} (11.44)).

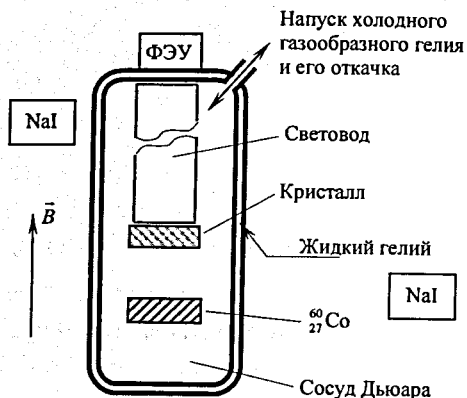


Рис. 9.2. Схема опыта группы Ву Цзиньсюн:
 — кристалл, соединённый световодом с ФЭУ;
 — счётчик электронов;
 — NaI — счётчики γ -квантов;
 соленоид, создающий магнитное поле, не показан

Вернёмся к "опыту мадам Ву", как его часто называют. В опыте (рис. 9.2) образец изотопа ^{60}Co , охлаждённый до температуры порядка 1 мК, помещался в поляризующее магнитное поле. Сцинтилляционный счётчик — кристалл нитрата церия-магния, соединённый с фотоумножителем (ФЭУ), регистрировал электроны, образующиеся при распаде ^{60}Co :



Изучалась угловая зависимость вылета электронов $N_e(\theta)$. Фактически в таком эксперименте можно измерять только две точки по углу θ : $\theta = 0, \pi$, когда магнитное поле и, соответственно, спины ядер направлены вверх или вниз, т. е. электроны β -распада ядра вылетают по направлению поля или против него. Из-за такой особенности постановки эксперимента часто можно встретить неверное описание опыта мадам Ву: изменение направления поля как-то связывают с операцией зеркального отражения координат. На самом деле это изменение направления \vec{B} требуется только для обеспечения регистрации электронов под углами 0 (по полю) или π (против поля) при фиксированном положении детектора. А мысленную операцию инверсии следует привлекать на стадии анализа экспериментов. Как сказано выше, в случае несохранения чётности функция $\psi(\theta)$ должна иметь асимметричный вид (9.11), т. е.

$$|\psi(\theta)|^2 \neq |\psi(\pi - \theta)|^2, \quad (9.17)$$

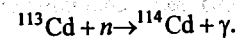
или

$$\frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-} = \Delta \neq 0. \quad (9.18)$$

Отметим одно существенное обстоятельство: сама система образца должна быть зеркально-симметричной, т. е. направления магнитных моментов ядер не должны менять знак при операции инверсии координат (9.1), (9.3). Далее, в § 11.3, мы увидим, что магнитный момент частицы жёстко "привязан" к её механическому моменту — спину. А механический момент является так называемым аксиальным вектором, который сохраняет знак при операции инверсии (см. подробнее § 10.1 ниже). Поэтому сама система поляризованных ядер инвариантна к этой операции, и обнаружение асимметрии ψ -функции (9.17), (9.18) свидетельствует о нарушении закона сохранения чётности. В опыте мадам Ву асимметрия наблюдалась на уровне [7]

$$\Delta \sim 0,25.$$

И ещё одна деталь этого эксперимента. Поляризация ядер ^{60}Co регистрировалась по измерению угловой зависимости $N_\gamma(\theta)$ интенсивности γ -квантов, которые испускаются возбуждёнными ядрами никеля, образующимися при β -распаде ^{60}Co (9.16). Эти γ -кванты регистрировались также сцинтилляционными счётчиками, но на основе кристалла иодида натрия NaI, (рис. 9.2). Естественно задать вопрос — нельзя ли по виду этой функции $N_\gamma(\theta)$ также судить о сохранении или нарушении чётности? Вопрос не столь тривиален, как может показаться на первый взгляд. Действительно, "высвечивание" возбуждённого ядра — результат взаимодействия его нуклонов, т. е. *сильное взаимодействие*, которое *сохраняет чётность*. Однако если при этом "примешивается" слабое взаимодействие, то должна появиться асимметрия вида (9.17), (9.18). И, действительно, такая асимметрия была обнаружена в экспериментах по захвату тепловых нейтронов ядрами ^{113}Cd :



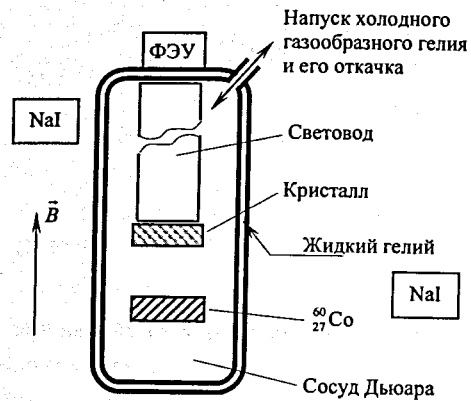


Рис. 9.2. Схема опыта группы Ву Цзиньсюн:
 - кристалл, соединённый световодом с ФЭУ;
 - счётчик электронов;
 - жидкий гелий;
 - ^{60}Co - образец;
 - соленоид, создающий магнитное поле, не показан

Вернёмся к "опыту мадам Ву", как его часто называют. В опыте (рис. 9.2) образец изотопа ^{60}Co , охлаждённый до температуры порядка 1 мК, помещался в поляризующее магнитное поле. Сцинтилляционный счётчик - кристалл нитрата церия-магния, соединённый с фотоумножителем (ФЭУ), регистрировал электроны, образующиеся при распаде ^{60}Co :



Изучалась угловая зависимость вылета электронов $N_e(\theta)$. Фактически в таком эксперименте можно измерять только две точки по углу θ : $\theta = 0, \pi$, когда магнитное поле и, соответственно, спины ядер направлены вверх или вниз, т. е. электроны β -распада ядра вылетают по направлению поля или против него. Из-за такой особенности постановки эксперимента часто можно встретить неверное описание опыта мадам Ву: изменение направления поля как-то связывают с операцией зеркального отражения координат. На самом деле это изменение направления \vec{B} требуется только для обеспечения регистрации электронов под углами 0 (по полю) или π (против поля) при фиксированном положении детектора. А мысленную операцию инверсии следует привлекать на стадии анализа экспериментов. Как сказано выше, в случае несохранения чётности функция $\psi(\theta)$ должна иметь асимметричный вид (9.11), т. е.

$$|\psi(\theta)|^2 \neq |\psi(\pi - \theta)|^2, \quad (9.17)$$

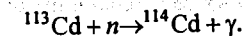
или

$$\frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-} = \Delta \neq 0. \quad (9.18)$$

Отметим одно существенное обстоятельство: сама система образца должна быть зеркально-симметричной, т. е. направления магнитных моментов ядер не должны менять знак при операции инверсии координат (9.1), (9.3). Далее, в § 11.3, мы увидим, что магнитный момент частицы жёстко "привязан" к её механическому моменту - спину. А механический момент является так называемым аксиальным вектором, который сохраняет знак при операции инверсии (см. подробнее § 10.1 ниже). Поэтому сама система поляризованных ядер инвариантна к этой операции, и обнаружение асимметрии ψ -функции (9.17), (9.18) свидетельствует о нарушении закона сохранения чётности. В опыте мадам Ву асимметрия наблюдалась на уровне [7]

$$\Delta \sim 0,25.$$

И ещё одна деталь этого эксперимента. Поляризация ядер ^{60}Co регистрировалась по измерению угловой зависимости $N_\gamma(\theta)$ интенсивности γ -квантов, которые испускаются возбуждёнными ядрами никеля, образующимися при β -распаде ^{60}Co (9.16). Эти γ -кванты регистрировались также сцинтилляционными счётчиками, но на основе кристалла иодида натрия NaI, (рис. 9.2). Естественно задать вопрос - нельзя ли по виду этой функции $N_\gamma(\theta)$ также судить о сохранении или нарушении чётности? Вопрос не столь тривиален, как может показаться на первый взгляд. Действительно, "высвечивание" возбуждённого ядра - результат взаимодействия его нуклонов, т. е. сильное взаимодействие, которое сохраняет чётность. Однако если при этом "примешивается" слабое взаимодействие, то должна появиться асимметрия вида (9.17), (9.18). И, действительно, такая асимметрия была обнаружена в экспериментах по захвату тепловых нейтронов ядрами ^{113}Cd :



Эти эксперименты, проведённые в 70-х гг. группой Ю.Г. Абова и П.А. Крупчицкого в Институте экспериментальной и теоретической физики (Москва), дали

$$\Delta\gamma = -(3,3 \pm 0,6) \cdot 10^{-4}.$$

§ 9.4. Комбинированная чётность. CPT-теорема*

Как уже сказано, наличие симметрий различного рода есть одно из важнейших свойств нашего мира. И симметрия по отношению к *преобразованию инверсии (P-преобразование)* является одной из них, но далеко не единственной. Прежде всего, нужно указать ещё на два преобразования, которые с точки зрения проверки симметрии мира являются наиболее принципиальными, т.е. они определяют законы, которым подчиняются физические процессы.

Первое из этих преобразований – операция *зарядового сопряжения (C-преобразование)*, заменяющая частицы на античастицы. При этом преобразовании знаки зарядов частиц изменяются на противоположные. Здесь уместно отметить, что, кроме привычного электрического заряда, частицам в современной физике приписывают и другие виды зарядов, отличающие их свойства. Так, *барионный заряд* (от греч. *barýs* – тяжёлый), отличный от нуля, свидетельствует о том, что частица может "участвовать" в сильном ("ядерном") взаимодействии. *Лептонный заряд* (от греч. *leptos* – лёгкий) отличен от нуля у частиц, которые участвуют в слабом и электромагнитном взаимодействиях, но не участвуют в сильном взаимодействии. C-преобразование изменяет знаки всех этих зарядов q_α :

$$\hat{C} \cdot \psi(\vec{r}, t, q_\alpha) = C \cdot \psi(\vec{r}, t, -q_\alpha),$$

где q_α – набор зарядов, характеризующих частицы системы, которая описывается данной ψ -функцией.

Если система симметрична по отношению к C-преобразованию, то из этого можно сделать вполне определённые выводы о её поведении. Так, например, в

реакции β -распада ядра ^{60}Co (9.16) фактически распадается один из нейтронов ядра:



Значок "~" (тильда) над символом нейтрино означает, что это античастица (точнее – *электронное нейтрино*). C-преобразование предписывает закон распада антинейтрона:



Обратим внимание на выполнение законов сохранения зарядов в этих реакциях, суммы которых в левых и правых частях этих "равенств" одинаковы (табл. 9.1).

Таблица 9.1. Заряды частиц в реакциях (9.19)–(9.21)

Частица \ Заряд	Электрический (в единицах e)	Барионный	Лептонный электронный
нейтрон n	0	+1	0
антинейтрон \tilde{n}	0	-1	0
протон p	+1	+1	0
антипротон \tilde{p}	-1	-1	0
электрон e^-	-1	0	+1
позитрон e^+	+1	0	-1
электронное нейтрино ν_e	0	0	+1
электронное антинейтрино $\tilde{\nu}_e$	0	0	-1
Суммарный заряд			
в реакции (9.19)	0	+1	0
в реакции (9.20)	0	-1	0
в реакции (9.21)	+1	+1	-1

Операция *обращения времени (T-преобразование)* изменяет направление хода времени. Конечно, выполнить такое преобразование буквально в природе невозможно. Однако рассмотреть действие операции T-преобразования вполне

можно, сравнив прямую и обратную реакции. Так, реакцией, обратной распаду нейтрона (9.19), будет реакция взаимодействия нейтрино с протоном:



И такая реакция *обратного β -распада нейтрона* была действительно обнаружена (Коуэн и Рейнес, 1953 г.) на потоке электронных антинейтрино из ядерного реактора. Тем самым одновременно экспериментально было показано, что в бета-распаде ядер образуются антинейтрино, т.к. в реакции (9.21) рождается античастица – позитрон.

Вскоре после подтверждения нарушения закона сохранения чётности в слабых взаимодействиях Л.Д. Ландау выдвинул гипотезу *сохранения комбинированной (CP) чётности в слабых взаимодействиях* – закон, известный под названием *CP-инвариантность*. С тех пор эта гипотеза является объектом интенсивной экспериментальной проверки. Уже в 1964 г. появились первые данные о *нарушении CP-инвариантности* в распадах нейтральных *K*-мезонов. И только совсем недавно такого же рода нарушения были экспериментально обнаружены в распадах заряженных *K*-мезонов. Обсуждение деталей этих исследований выходит за рамки данного курса.

Гипотеза Ландау была высказана не случайно. Дело в том, что ещё раньше, в 1952–1953 гг., Г. Людерсом (*G. Lüders*) и В. Паули (*W. Pauli*) была доказана так называемая *CPT-теорема*, утверждающая, что релятивистская квантовая теория инвариантна относительно одновременно произведённых *C*-, *P*- и *T*-преобразований. Поскольку в *T*-инвариантности оснований (в то время) сомневаться не было, то из инвариантности системы по отношению к *CPT*-преобразованию следовала инвариантность к преобразованиям по частям – *CP* и *T*.

Заметим, что нарушение *CP*-инвариантности означает, при условии *CPT*-инвариантности, нарушение *T*-инвариантности, что и имеет место в слабых взаимодействиях. Однако объяснение этого нарушения довольно нетривиально и также недоступно на уровне нашего курса.

ГЛАВА 10. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

§ 10.1. Оператор момента импульса

В классической механике момент импульса определен как

$$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}], \quad (10.1)$$

где \vec{r} – радиус-вектор из начала отсчета (точка 0) в точку, где находится частица, обладающая импульсом \vec{p} . Существенно, что это момент импульса частицы *относительно* точки 0 (рис. 10.1). Ещё одна особенность вектора \vec{L} – это так называемый *аксиальный вектор*. В отличие от "обычного" полярного вектора, который меняет знак при операции инверсии (9.1), аксиальный вектор знака не изменяет. Действительно,

$$\text{при } \vec{r} \rightarrow -\vec{r}$$

имеем

$$\vec{p} \rightarrow -\vec{p}, \quad \vec{L} \rightarrow [-\vec{r}, -\vec{p}] = \vec{L}.$$

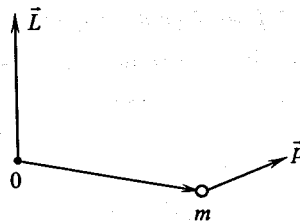


Рис. 10.1. Момент импульса частицы в классической механике

В квантовой механике естественно возникает *оператор момента импульса*, если в выражение (10.1) вместо импульса подставить его оператор (8.10):

$$\hat{L} = -i\hbar \cdot [\vec{r}, \nabla]. \quad (10.2)$$

Соответственно, компоненты этого векторного оператора запишем, раскрыв векторное произведение. Напомним *правило пользования* векторным дифференциальным оператором: нельзя произвольно менять местами функцию

координат-времени и оператор, если первая может быть продифференцирована. Поэтому в данном случае компоненты вектора \vec{r} нельзя "вносить под оператор".

Запишем в декартовых координатах (e_x, e_y, e_z -орты)

$$\hat{L} = -i\hbar \cdot \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}, \quad (10.3)$$

откуда

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \cdot \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= +i\hbar \cdot \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right), \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \cdot \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (10.4)$$

В сферических координатах вектор градиента имеет компоненты

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (10.5)$$

Этот результат легко получить, воспользовавшись определением сферических координат и их приращений по взаимно ортогональным (базисным) направлениям (рис. 10.2):

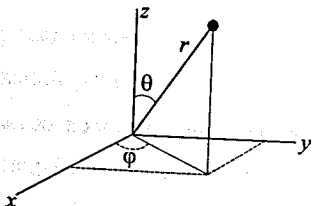


Рис. 10.2. Сферическая (r, θ, φ) и декартова (x, y, z) системы координат

$$x = r \sin \theta \cdot \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \cdot \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta; \quad (10.6)$$

приращения:

$$\begin{aligned} \text{по } r &\rightarrow dr, \\ \text{по } \theta &\rightarrow r d\theta, \\ \text{по } \varphi &\rightarrow r \sin \theta \cdot d\varphi. \end{aligned} \quad (10.7)$$

Задача 10.1. Найти выражение оператора \hat{L}_x в сферических координатах.

Попробуем решить задачу "в лоб", подставив в выражение \hat{L}_x из (10.4) значения координат и производных, записанные в сферических координатах. Для этого нам потребуются обратные соотношения для сферических координат через декартовы:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \cos \theta = \frac{z}{r}, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}. \quad (10.8)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{xz}{r^3} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{y \cdot \cos^2 \varphi}{x^2} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{yz}{r^3} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos^2 \varphi}{x} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned}$$

Подставив эти выражения для производных в формулу для \hat{L}_x (10.4), без труда находим

$$\hat{L}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (10.9)$$

Задача 10.2. Выразить операторы \hat{L}_x и \hat{L}_y в сферических координатах.

Аналогично предыдущей задаче вычислим производную

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{x^2 + y^2}{r^3 \cdot \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

и, подставив выражения для производных в (10.4), найдем

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= i\hbar \cdot \left(\sin \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cdot \cos \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \cdot \left(\cos \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \cdot \sin \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \end{aligned} \quad (10.10)$$

Задача 10.3. Выразить оператор \hat{L}^2 в сферических координатах.

Памятуя о правиле пользования дифференциальными операторами, вычислим

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2,$$

подставив значения $\hat{L}_{x,y,z}$ из (10.4). Тогда, например, для первого члена найдем

$$\begin{aligned} \hat{L}_x^2 &= -\hbar^2 \cdot \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \cdot \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \\ &= -\hbar^2 \left(\sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\sin \varphi \cdot \cos \varphi}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \operatorname{ctg} \theta \cdot \sin \varphi \cdot \cos \varphi \cdot \frac{\partial^2}{\partial \theta \cdot \partial \varphi} + \operatorname{ctg} \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \right. \\ &\quad \left. + \cos \varphi \cdot \sin \varphi \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi \cdot \partial \theta} - \operatorname{ctg}^2 \theta \cdot \cos \varphi \cdot \sin \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} + \operatorname{ctg}^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \end{aligned}$$

Аналогичное (и такое же громоздкое) выражение получим для \hat{L}_y^2 , а также

$$\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Сложив эти выражения, найдем

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi^2} \right).$$

Свернув два первых слагаемых, окончательно запишем

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= -\hbar^2 \cdot \Delta_{\theta, \varphi}, \\ \Delta_{\theta, \varphi} &= \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \end{aligned} \quad (10.11)$$

Оператор $\Delta_{\theta, \varphi}$ есть не что иное, как угловая часть оператора Лапласа, записанного в сферических координатах (см. (7.54)).

Задача 10.4. Найти выражение для коммутатора $[\hat{L}_x, \hat{L}_z]$.

Проще всего рассмотреть задачу в декартовой системе координат:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_z] \equiv \hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x = -\hbar^2 \left(\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \cdot \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right).$$

Выпишем последовательно все производные, стоящие в скобках:

$$xy \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} - y^2 \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - zx \frac{\partial^2}{\partial^2 y} + z \frac{\partial}{\partial x} + zy \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} - xy \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + xz \frac{\partial^2}{\partial^2 y} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} - yz \frac{\partial^2}{\partial x \partial y},$$

откуда видно, что все вторые производные сокращаются, и в результате получаем

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = \hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \hat{L}_y.$$

Аналогичные выражения можно получить для коммутаторов операторов других пар проекций момента импульса. Таким образом, операторы проекций момента импульса попарно не коммутируют, это означает, что одновременно все проекции импульса не могут иметь определенные значения.

§ 10.2. Собственные функции и собственные значения

оператора \hat{L}_z

Прежде всего скажем несколько слов по поводу выбора координатных осей. Уже из сравнения выражений (10.9) и (10.10) можно заметить, что ось z выделена – формула для оператора \hat{L}_z много проще формул для \hat{L}_x и \hat{L}_y , которые к тому же имеют сходную структуру. Тем самым можно заключить, что ось z – некоторое выделенное направление. Дальше мы увидим, что описание квантовой системы (набор и вид формул) существенно зависит от выбора этого направления. И это объективный факт, отмеченный при обсуждении принципа дополнительности (§ 5.3): выбирая направление осей, исследователь "вторгается" в исследуемую систему. Существуют, однако, ситуации, когда в системе присутствует выделенное направление. Это имеет место, например, при движении частицы или атома в электромагнитном поле (§§ 11.5, 11.6 и гл. 18). Тогда естественно в качестве оси z выбрать направление поля \vec{B} или \vec{E} .

Для нахождения собственных функций оператора \hat{L}_z и его собственных значений L_z запишем уравнение вида (8.16)

$$\hat{L}_z \Phi(\varphi) = L_z \cdot \Phi(\varphi),$$

где $\Phi(\varphi)$ – собственная функция, зависящая только от координаты φ , т.к. оператор \hat{L}_z действует только на эту координату, если мы пользуемся сферической системой координат (см. (10.9)):

$$-i\hbar \frac{d\Phi}{d\varphi} = L_z \Phi.$$

Отсюда

$$\Phi(\varphi) = C \cdot e^{k\varphi}, \quad k = \frac{iL_z}{\hbar}. \quad (10.12)$$

Поскольку функция $\Phi(\varphi)$ должна быть однозначной функцией координат точки пространства, то $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi n)$, где n – любое целое, включая единицу.

Поэтому

$e^{\kappa 2\pi i} = 1$, т.е. $2\pi i \kappa = 2\pi i m'$, m' – целое действительное число.

Отсюда находим $\kappa = im'$, т.е. $\kappa = im \rightarrow$ есть целое мнимое число. Подставив это значение в (10.12), получим

$$L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (10.13)$$

Соответственно, собственные функции оператора \hat{L}_z имеют вид

$$\Phi(\varphi) = C_m \cdot e^{im\varphi}. \quad (10.14)$$

Константы C_m находим из условия нормировки:

$$\int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 \cdot d\varphi = 1,$$

что даёт

$$|C_m| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

По своему физическому смыслу L_z есть значение проекции момента частицы на (см. ниже!) ось z . Поэтому величина L_z не может превышать некоторого максимального значения, соответствующего в классической механике величине момента импульса. Соответственно, можно утверждать, что параметр m , именуемый магнитным квантовым числом (смысл этого названия будет понятен позднее, см. § 11.6), пробегает ряд возможных значений

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, 1, \dots, \ell - 1, \ell, \quad (10.15)$$

где ℓ – некоторое число, связанное, как мы увидим в следующем параграфе, со значением полного момента импульса L (см. § 10.18).

§ 10.3. Операторы \hat{L}_x , \hat{L}_y . Выбор осей. Значение L^2

Уже из соотношений (10.10) видно, что функция (10.14) хотя формально и удовлетворяет уравнению вида (8.16) для операторов \hat{L}_x и \hat{L}_y , тем не менее не является собственной функцией этих операторов, т.к. не зависит от полярного угла θ , производные по которому содержатся в этих операторах. Более того,

можно утверждать, что операторы \hat{L}_x , \hat{L}_y , \hat{L}_z не имеют общей (отличной от нуля) собственной функции. Это следует из решения задачи 10.4.

С другой стороны, выбор направления оси z , вообще говоря, ничем не выделен, поэтому результат, полученный в § 10.2 для \hat{L}_z , должен быть справедлив для \hat{L}_x и \hat{L}_y – все три проекции оператора \hat{L} могут принимать только целочисленные значения. Более того, из равноправности осей следует, что средние значения квадратов модулей проекций момента равны:

$$\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \langle L_z^2 \rangle. \quad (10.16)$$

В случае, когда квадрат момента импульса имеет определенное значение, согласно (8.32),

$$L^2 = \langle L^2 \rangle,$$

то, используя (10.16), можно записать

$$L^2 = \langle L^2 \rangle = 3 \langle L_z^2 \rangle. \quad (10.17)$$

В свою очередь, L_z принимает одно из значений (10.13), и всего таких значений, согласно (10.15), $2\ell + 1$. Поэтому

$$\langle L_z^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2\ell + 1} \cdot \sum_{m=-\ell}^{\ell} m^2.$$

Сумма ряда чисел m^2 равна

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} m^2 = 2 \sum_{m=1}^{\ell} m^2 = 2 \cdot \frac{\ell(\ell+1)(2\ell+1)}{6}.$$

Отсюда

$$\langle L_z^2 \rangle = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{3}, \quad L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1). \quad (10.18)$$

Во втором равенстве снят знак усреднения $\langle \rangle$, что можно сделать, учитывая соотношение (8.32) между $\langle L \rangle$ и L . Таким образом, в (10.18) мы получили значение полного момента импульса L – оно характеризуется числом ℓ , которое называют орбитальным квантовым числом.

И еще одна важная особенность этого результата. Мы не случайно оставили знак $\langle \rangle$ у L_z^2 – это действительно *среднее значение квадрата оператора* \hat{L}_z по всем возможным состояниям с разными m (напомним, что их $2\ell + 1$). Но для всех состояний величина L^2 – одна и та же, т.е. для оператора \hat{L} это одно и то же состояние. Говорят, что в таком случае это *состояние вырождено* – в данном случае по квантовому числу m , которое при заданном ℓ имеет $2\ell + 1$ возможных значений.

Отметим еще одну особенность момента импульса и его компонент. Сравнивая L из (10.18) и L_z из (10.13), видим, что

$$|L_z| = |m| \cdot \hbar \leq \ell \hbar < \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \hbar = L,$$

т.е. всегда (рис. 10.3)

$$|L_z| < L. \quad (10.19)$$

Это означает, что вектор момента импульса не может быть точно совмещен с осью z , он всегда "длиннее" (!) максимальной величины своей проекции на *выделенное направление* (см. сказанное в начале предыдущего параграфа). Из этого результата следует вывод: можно сколь угодно точно определить величины L_z и L , но при этом остается неопределенность значений L_x и L_y . В частности, при $L_z = \ell \hbar$ на долю поперечных компонент "остаётся"

$$\sqrt{L_x^2 + L_y^2} = \sqrt{L^2 - L_z^2} = \sqrt{\ell \hbar}. \quad (10.20)$$

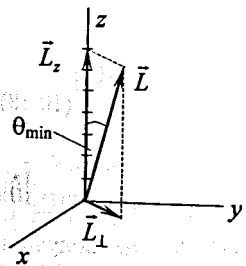


Рис. 10.3. Вектор \vec{L} и его максимально возможная проекция на ось z :

$$\ell = 7, \quad \theta_{\min} = \text{Arc cos} \frac{7}{\sqrt{56}} = 20^\circ 40'$$

§ 10.4. Собственные функции оператора \hat{L}^2

Будем искать решение уравнения вида (8.16) для оператора \hat{L}^2 :

$$\hat{L}^2 \cdot Y(\theta, \varphi) = L^2 \cdot Y(\theta, \varphi). \quad (10.21)$$

Воспользуемся *методом разделения переменных*, представив искомую функцию в виде

$$Y(\theta, \varphi) = P(\theta) \cdot \Phi(\varphi). \quad (10.22)$$

Подставив это выражение в (10.21) и учитывая (10.11), запишем

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{dP}{d\theta} \right) \cdot \Phi + \frac{P}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -\frac{L^2}{\hbar^2} \cdot P \cdot \Phi. \quad (10.23)$$

Поделив обе части этого уравнения на $Y = P \cdot \Phi$ и подставив значение L^2 (10.18), получим

$$\sin^2 \theta \cdot \left[\frac{1}{P \sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{dP}{d\theta} \right) + \ell(\ell+1) \right] = -\frac{1}{\Phi} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2}. \quad (10.24)$$

Отметим, что здесь и в (10.23) стоят полные, а не частные производные, поскольку $P(\theta)$ и $\Phi(\varphi)$ – функции одного аргумента (каждая своего).

Традиционно решение уравнений такого вида основано на использовании независимости их левой и правой частей, в которых содержатся функции разных аргументов. В нашем случае в левой части стоит функция θ , а в правой – функция φ . Поэтому равенство возможно только в одном случае – когда обе части равенства равны некоторой константе. Обозначив её через C^2 , запишем

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -C^2 \Phi, \quad (10.25)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{dP}{d\theta} \right) + \left(\ell \cdot (\ell+1) - \frac{C^2}{\sin^2 \theta} \right) \cdot P = 0.$$

Из первого уравнения имеем

$$\Phi(\varphi) = A \cdot e^{iC\varphi} + B \cdot e^{-iC\varphi}.$$

Учитывая периодичность функции $\Phi(\varphi)$, как это делалось в § 10.2, найдем

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi), \quad \text{т.е. } e^{\pm iC\pi} = 1,$$

откуда

$$C \cdot 2\pi = 2\pi m, \quad m - \text{целое,}$$

т.е.

$$C = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Таким образом, $\Phi(\varphi)$ имеет тот же вид, что и собственные функции оператора L_z (10.14):

$$\Phi(\varphi) = C_m \cdot e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (10.26)$$

Теперь уравнение для $P(\theta)$ в (10.25) можно представить в виде

$$\frac{d}{d\xi} \left((1-\xi^2) \frac{dP}{d\xi} \right) + \left(\ell \cdot (\ell+1) - \frac{m^2}{1-\xi^2} \right) \cdot P = 0, \quad (10.27)$$

$$\xi = \cos \theta.$$

Это уравнение для так называемых *присоединенных полиномов Лежандра*, которые описываются формулой

$$P_\ell^m(\cos \theta) = \frac{\sin^m \theta}{2^\ell \cdot \ell!} \cdot \frac{d^{\ell+m}}{(d \cos \theta)^{\ell+m}} (\cos^2 \theta - 1)^\ell. \quad (10.28)$$

Функции

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = P_\ell^m(\cos \theta) \cdot \Phi(\varphi), \quad (10.29)$$

нормированные на единицу, называют *шаровыми*. Оставляя вычисление нормировочных множителей (с подстановкой в (10.29) выражений (10.26) и (10.28)) для курса математической физики, приведем окончательный результат:

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell-|m|)!}{\ell+|m|!}} \cdot P_\ell^m(\cos \theta) \cdot e^{im\varphi}. \quad (10.30)$$

Их явный вид при малых значениях ℓ, m дается формулами

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} & Y_{1\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos \theta & Y_{2\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \cdot (3\cos^2 \theta - 1) & Y_{2\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cdot e^{\pm i2\varphi}. \end{aligned} \quad (10.31)$$

В теории полиномов Лежандра показывается, что индексы m и ℓ связаны условием

$$|m| \leq \ell, \quad (10.32)$$

что совпадает с (10.15). Таким образом, завершается физическая картина всего математического § 10.4: шаровые функции $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$, являющиеся собственными функциями оператора \hat{L}^2 , зависят как от значения модуля момента импульса $L = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}$, так и от значения его проекции на ось z : $L_z = m\hbar$. Сама шаровая функция содержит в качестве сомножителя собственную функцию оператора \hat{L}_z .

Из формул (10.28–10.30) следуют свойства симметрии шаровых функций. Их выясним, заметив, что при операции инверсии угловые координаты θ и φ преобразуются (рис. 9.1) в соответствии с (9.3). А т.к. $\sin(\pi - \theta) = \sin \theta$, $\cos(\pi - \theta) = -\cos \theta$, то из (10.28) найдем

$$P_\ell^m(\cos(\pi - \theta)) = (+1)^m \cdot (-1)^{\ell+m} \cdot P_\ell^m(\cos \theta), \quad (10.33)$$

а из (10.30)

$$e^{im(\varphi+\pi)} = (-1)^m \cdot e^{im\varphi}.$$

В результате получим

$$\hat{P}Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = (-1)^\ell \cdot Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (10.34)$$

т.е. четность шаровых функций определяется квантовым числом ℓ :

функции $Y_{\ell m}$ $\begin{cases} \text{четные для четных } \ell, \\ \text{нечетные для нечетных } \ell. \end{cases}$

§ 10.5. Правила сложения моментов

Все рассмотрение в §§ 10.1–10.4 относится к одной частице. Рассмотрим теперь систему из *двух независимых частиц*. Если каждая из них описывается своей волновой функцией, то тогда система из двух частиц, не

взаимодействующих друг с другом, будет описываться функцией, равной произведению волновых функций частиц:

$$\psi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2). \quad (10.35)$$

Это следует из вероятностного характера ψ -функции: вероятность того, что два независимых события происходят одновременно, равна произведению вероятностей свершения каждого из событий.

Применим формулу (10.35) к шаровым функциям и учтем, что оператор \hat{L}_z действует только на координату φ . Тогда оператор \hat{L}_z двух частиц, равный

$$\hat{L}_z = \hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z},$$

действуя на свою собственную функцию, дает (см. (10.12)–(10.14))

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \cdot Y_{12}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) &= \hat{L}_z \cdot Y_1(\theta_1, \varphi_1) \cdot Y_2(\theta_2, \varphi_2) = \\ &= (\hat{L}_{1z} \cdot Y_1) \cdot Y_2 + Y_1 \cdot \hat{L}_{2z} \cdot Y_2(\theta_2, \varphi_2) = (m_1 + m_2) \cdot \hbar \cdot Y_{12}. \end{aligned} \quad (10.36)$$

Таким образом, магнитное квантовое число системы из двух независимых частиц равно сумме этих чисел каждой из частиц:

$$\begin{aligned} m_{12} &= m_1 + m_2, \\ (L_{12})_z &= (m_1 + m_2) \cdot \hbar. \end{aligned} \quad (10.37)$$

Всего m_{12} имеет $(2\ell_1 + 1) \cdot (2\ell_2 + 1)$ возможных значений. Несколько сложнее обстоит дело с полным моментом и его квантовым числом ℓ_{12} . Результат (10.37) означает не что иное, как обычное (классическое) сложение проекций моментов двух частиц на ось z . Однако применять правило сложения векторов к полным моментам нельзя, т.к. их положение в пространстве известно с некоторой неопределенностью (см. формулу (10.20) и текст перед ней). Но здесь на помощь приходит результат (10.37). Пусть у нас заданы квантовые числа векторов \vec{L}_1 и \vec{L}_2 : ℓ_1, m_1, ℓ_2, m_2 . Этот набор квантовых чисел, характеризующих состояние системы, принято обозначать

$$\langle \ell_1, m_1, \ell_2, m_2 \rangle. \quad (10.38)$$

Далее мы поясним это обозначение подробнее. Если m_1 и m_2 известны (измерены), то известно также значение их суммы

$$m_{12} = m_1 + m_2.$$

Поэтому суммарный момент \vec{L}_{12} может принимать такое значение, что соответствующее ему квантовое число

$$\ell_{12} \geq |m_{12}|, \quad (10.39)$$

т.к. вектор всегда не короче своей проекции. Соответственно, модуль этого вектора есть (см. (10.18))

$$L_{12} = \hbar \sqrt{\ell_{12}(\ell_{12} + 1)}. \quad (10.40)$$

Очевидно, что

$$(\ell_{12})_{\min} = m_{12}, \quad (\ell_{12})_{\max} = (m_1)_{\max} + (m_2)_{\max} = \ell_1 + \ell_2. \quad (10.41)$$

Таким образом, ℓ_{12} может принимать все значения из целочисленного ряда

$$\ell_{12} = m_{12}, m_{12} + 1, \dots, \ell_1 + \ell_2.$$

Теперь зададим вопрос, какие значения может принимать ℓ_{12} при заданных ℓ_1 и ℓ_2 и всех возможных при этом значениях m_1 и m_2 . Максимальное значение ℓ_{12} определено в (10.41). С минимальным несколько сложнее. Выберем номера 1 и 2, например, так, что

$$\ell_1 > \ell_2. \quad (10.42)$$

Очевидно, минимальному значению ℓ_{12} соответствует случай, когда векторы \vec{L}_1 и \vec{L}_2 антипараллельны, т.е. в нашем случае

$$(\ell_{12})_{\min} = \ell_1 - \ell_2.$$

В этом нетрудно убедиться, вспомнив, что ℓ_{12} может принимать любые целочисленные значения от $(\ell_{12})_{\max}$ до $(\ell_{12})_{\min}$:

$$\ell_{12} = \ell_1 + \ell_2, \ell_1 + \ell_2 - 1, \dots, \ell_1 - \ell_2, \quad (10.43)$$

но значения меньше $\ell_1 - \ell_2$ запрещены, т.к. тогда соответствующее максимальное значение проекции на ось z не достигает значения величины $m_1 - m_2$.

При произвольном выборе номеров 1, 2 всегда справедливо утверждение

$$(\ell_{12})_{\min} = |\ell_1 - \ell_2|.$$

Таким образом, мы установили, что

$$|\ell_1 - \ell_2| \leq \ell_{12} \leq \ell_1 + \ell_2. \quad (10.44)$$

Закон сложения моментов удобно пояснить на векторной модели (рис. 10.5). Рассмотрим, для простоты, случай, когда два вектора, \vec{L}_1 и \vec{L}_2 , лежат ("мгновенно") в одной плоскости. В том случае, когда проекции обоих векторов на ось z имеют максимальное и положительное значение (рис. 10.5, а), суммарный вектор может иметь только одно значение, когда $\ell = \ell_1 + \ell_2$, т.к. $m = m_1 + m_2 = \ell_1 + \ell_2$ в данном случае. Это соответствует в классической механике *параллельным векторам* \vec{L}_1 и \vec{L}_2 . Если же m_1 или/и m_2 меньше своих максимальных значений ℓ_1 и ℓ_2 , суммарный вектор L может иметь несколько значений, соответствующих ℓ_{12} между $\ell_1 + \ell_2$ и m_{12} , но таких, что проекция \vec{L} на ось z равна $\hbar \cdot (m_1 + m_2)$ (рис. 10.5, б). И, наконец, при $m_1 = \ell_1, m_2 = -\ell_2$ имеет место случай "антипараллельных" векторов момента.

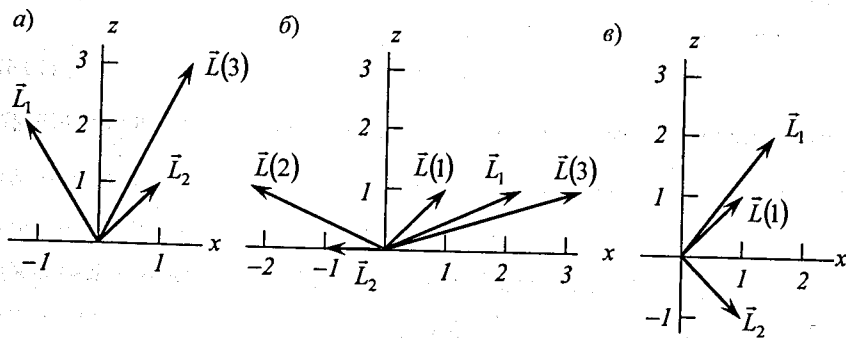


Рис. 10.5. Сложение двух моментов с квантовыми числами $\ell_1 = 2, \ell_2 = 1$.

Рассмотрен случай, когда оба вектора лежат в плоскости (x, z) :

а) "параллельные" моменты: $m_1 = 2, m_2 = 1$;

б) $m_1 = 1, m_2 = 0$;

в) "антипараллельные" моменты: $m_1 = 2, m_2 = -1$.

В скобках на рисунке указаны значения ℓ_{12} . Подчеркнём, что значения L_x здесь определены с точностью до знака

Задача 10.5. Найти возможные собственные значения вектора $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$, если $\ell_1 = 5, \ell_2 = 10, m_1 = 2, m_2 = -9$.

Поскольку $m = m_1 + m_2 = -7$, то среди значений ℓ (10.40) реализуются только те, для которых

$$\ell \geq |m|.$$

В рассматриваемом случае найдем

$$\ell = 15, 14, 13, \dots, 7.$$

Проведенное рассмотрение показывает, что правила сложения квантовых моментов независимых частиц не имеют ничего общего с правилами сложения обычных (классических) векторов. Кроме того, употребляя слово "мгновенно" применительно к положениям векторов \vec{L} в пространстве, мы имели в виду результат мгновенного измерения этого положения. Вектор момента \vec{L} может занимать в пространстве все возможные положения, при которых значение m равно сумме $m_1 + m_2$, а угол φ лежит между 0 и 2π .

Задача 10.6. Найти правило сложения чётностей в системе из двух независимых частиц.

Поскольку $Y_{12} = Y_1 \cdot Y_2$ (см. (10.35)), то действие оператора чётности на функцию $Y_{12}(\theta, \varphi)$ можно представить в виде (см. (10.33))

$$\begin{aligned} \hat{P}Y_{12}(\theta, \varphi) &= \hat{P}Y_1(\theta, \varphi) \cdot Y_2(\theta, \varphi) = Y_1(\pi - \theta, \varphi + \pi) \cdot Y_2(\pi - \theta, \varphi + \pi) = \\ &= (-1)^{\ell_1} Y_1(\theta, \varphi) \cdot (-1)^{\ell_2} Y_2(\theta, \varphi) = (-1)^{\ell_1 + \ell_2} \cdot Y_{12}(\theta, \varphi). \end{aligned}$$

Таким образом, чётность состояния из двух независимых частиц есть

$$P_{12} = (-1)^{\ell_1 + \ell_2}. \quad (10.45)$$

Сложение моментов N независимых частиц производится путём последовательного применения описанных выше правил. Задача 10.7 иллюстрирует это на примере системы из трёх частиц.

Задача 10.7. Сформулировать правило сложения моментов трех независимых частиц.

Рассматривая суммарный момент двух частиц как момент единой системы, запишем:

$$\begin{aligned} \vec{L}_{123} &= \vec{L}_{12} + \vec{L}_3, \\ \ell_{12} + \ell_3 &\leq \ell_{123} \leq |\ell_{12} - \ell_3|, \quad m_{123} = m_{12} + m_3. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\begin{aligned} m_{123} &= m_1 + m_2 + m_3, \\ \ell_{123} &= \ell_1 + \ell_2 + \ell_3, \quad \ell_1 + \ell_2 + \ell_3 - 1, \dots, \|\ell_1 - \ell_2 - \ell_3\|. \end{aligned} \quad (10.46)$$

В заключение этой главы скажем, что рассмотренный здесь момент частицы называют *орбитальным моментом* – термин, заимствованный в "старой" квантовой механике Бора из классической механики. Он сохранился в "новой" квантовой механике и перешёл в физику атомного ядра и частиц, хотя, как мы уже знаем, никаких орбит электрона в атоме не существует. Правильнее говорить, что орбитальный момент – характеристика взаимодействия между ядром и электроном, которая описывается так, как *если бы* электрон-частица имел орбитальный механический момент. Но определяет эта характеристика вид волновой функции (т.е. вероятностную величину!). В следующей главе появляется *собственный момент* частицы, или *спин*.

ГЛАВА 11. СПИН

§ 11.1. Гипотеза Уленбека и Гаудсмита. Спин частицы.

Фермионы и бозоны. Полный момент частицы

Предположение о существовании собственного механического момента импульса у частиц было впервые высказано в 1925 г. голландскими физиками Дж. Уленбеком (*G. Uhlenbeck*) и С. Гаудсмитом (*S. Goudsmit*) на основе анализа спектров излучения атомов – их тонкой структуры (см. гл. 14). Они предложили модель электрона в виде вращающегося заряженного шарика, или волчка – отсюда название "спин" (от англ. *spin* – верчение, волчок). Эта модель не укладывается в современные представления об электроне – точечной заряженной

частице. Тем не менее сомнений в том, что эта "точка", обладающая электрическим зарядом и инертной/гравитационной массой, имеет еще и собственный механический момент, ни у кого нет. Более того, величина этого момента, постулированная Уленбеком и Гаудсмитом,

$$S_e = \frac{\hbar}{2}, \quad (11.1)$$

остается для электрона до сих пор экспериментально неизменной.

В квантовую механику спин был введен В. Паули (*W. Pauli*) в 1925 г.

Сегодня известно, что спином обладает большинство элементарных частиц. При этом все частицы делятся на два класса – *фермионы*, спин которых полуцелый, и *бозоны* – частицы с целым или нулевым спином. Названия даны в честь физиков, предложивших описание статистических свойств частиц. Частицы с полуцелым спином описываются *статистикой Ферми–Дирака* (*E. Fermi, P. Dirac* – ввели независимо в 1926 г.), а частицы с целым спином – *статистикой Бозе–Эйнштейна* (*S.N. Bose* ввел в 1924 г. для квантов света – фотонов, несколько позднее *A. Einstein* обобщил на частицы с целым спином). Деление частиц по их статистическим свойствам на бозоны и фермионы было строго доказано Паули в 1940 г.

К *фермионам* относятся *лептоны* – электромагнитно- и слабо- взаимодействующие частицы: электрон, мюон, τ -лептон и три типа нейтрино, и *барионы* – одна из двух разновидностей сильновзаимодействующих частиц (*адроны*), в числе которых частицы ядра протон и нейтрон, гипероны и другие короткоживущие тяжелые частицы (с массой, превышающей массу протона).

К *бозонам* относятся *фотон* (спин равен \hbar) и *мезоны* – сильновзаимодействующие короткоживущие частицы с массой, меньшей массы протона, но многократно превосходящей массу электрона.

Атомные ядра и атомы, в зависимости от их структуры, могут иметь как полуцелый, так и целый (в том числе нулевой) спин. Так, например, спин ядра водорода (протона), как уже говорилось, равен $\hbar/2$, а спин дейтрона – тяжелого

изотопа водорода, состоящего из одного протона и одного нейтрона, равен \hbar . Спин α -частицы — ядра гелия (два протона и два нейтрона) равен нулю.

Величину спина принято измерять в единицах \hbar . Поэтому, когда говорят, например, что "спин частицы равен единице", имеют в виду его равенство константе \hbar и т.д.

В гл. 12 мы увидим, что от спина системы зависят ее свойства симметрии.

Теперь внесем некоторую ясность в понятие спина, связав его свойства со свойствами момента импульса частицы, рассмотренного в гл. 10. Прежде всего, поскольку спин является по определению собственным механическим моментом частицы, на него можно распространить всё сказанное в гл. 10 об *орбитальном моменте* частицы \vec{L} . Поэтому величина S_z , введенная выше (11.1), есть по своему физическому смыслу то же самое, что и величина L_z , и спин частицы можно, как это принято, описывать *спиновым квантовым числом* s (его на физическом жаргоне также для краткости называют "спин"). Таким образом, модуль вектора спина есть

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar. \quad (11.2)$$

Полный момент импульса частицы складывается из суммы орбитального и собственного моментов:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad |\vec{J}| = \hbar \sqrt{j(j+1)}, \quad (11.3)$$

где сложение производится в соответствии с правилами, описанными в § 10.5:

$$j = \ell + s, \quad \ell + s - 1, \dots, |\ell - s|. \quad (11.4)$$

Соответственно, проекция вектора \vec{S} на выбранное направление ("ось z ") может принимать значения

$$S_z = s_z \hbar, \quad s_z = s, s - 1, \dots, -s, \quad (11.5)$$

и, в соответствии с правилом сложения (10.37),

$$m_j = m + s_z. \quad (11.6)$$

Задача 11.1. Найти значение собственного момента импульса (спина) фотона, рассмотрев передачу энергии и момента импульса электрону в атоме Бора, находящемся в поле циркулярно-поляризованной электромагнитной волны. Орбиту электрона считать круговой, вектор \vec{E} волны лежит в плоскости орбиты.

В циркулярно-поляризованной волне, распространяющейся вдоль оси z , компоненты вектора \vec{E} описываются выражениями

$$E_x(x, t) = E_0 \cos(kz - \omega t), \quad E_y = E_0 \sin(kz - \omega t),$$

если начало отсчёта и направления осей координат выбраны так, что при $t = 0$ поле в точке $z = 0$ направлено вдоль оси x . Вектор \vec{E} в каждой точке пространства вращается вокруг оси z с частотой ω (рис. 11.1). Поместим начало отсчёта ($x = y = z = 0$) в точку нахождения ядра атома. На электрон, находящийся в точке (x, y) плоскости $z = 0$, действуют поле ядра и поле волны. Запишем уравнения движения электрона в цилиндрических координатах:

$$m\ddot{r} - m\dot{\phi}^2 r = -\frac{e^2}{r^2} - eE_r(t),$$

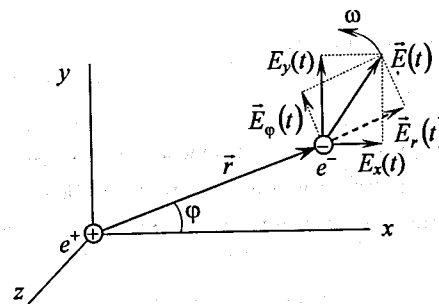


Рис. 11.1. Атом в поле циркулярно-поляризованной плоской монохроматической волны, распространяющейся вдоль оси z

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d(mr^2\dot{\phi})}{dt} = -eE_\phi(t) \cdot r. \quad (11.7)$$

Здесь учтено, что заряд электрона $-e$. Будем считать, что частота волны совпадает с частотой вращения электрона (резонанс!):

$$\dot{\phi} = \omega.$$

В этом случае задача резко упрощается: в каждый момент времени поле \vec{E} в точке нахождения электрона составляет один и тот же угол с вектором \vec{r} , который, как и вектор \vec{E} , за интервал времени Δt поворачивается на тот же угол

$$\Delta\phi = \omega \cdot \Delta t.$$

Поэтому компоненты E_r и E_ϕ в уравнениях движения — постоянные, не зависящие от времени.

Если волна имеет такую интенсивность, что на атом падает n фотонов в секунду, то электрону в единицу времени передается момент

$$\frac{dL}{dt} = nS_{\text{photon}},$$

где S_{photon} – спин фотона. Одновременно энергия, передаваемая в единицу времени электрону от волны, с учётом (11.7), может быть представлена выражением

$$\frac{dE}{dt} = -eE_{\varphi} \cdot v_{\varphi} = -eE_{\varphi} r \cdot \omega = \frac{dL}{dt} \cdot \omega = nS_{\text{photon}} \cdot \omega.$$

Приравнявая последнее выражение энергии, передаваемой волной электрону в секунду,

$$\frac{dE}{dt} = n\hbar\omega,$$

окончательно находим

$$|\vec{S}_{\text{photon}}| = \hbar, \quad s_{\text{photon}} = 1. \quad (11.8)$$

Отметим, что выбор волны с циркулярной поляризацией здесь не случаен. Во-первых, легко убедиться, что для линейно-поляризованной волны приведенное решение не справедливо. Во-вторых, любую линейно-поляризованную волну можно представить в виде суперпозиции двух лево- (L) и право- (R) циркулярно-поляризованных волн:

$$\begin{aligned} \vec{E}(x, t) &= \vec{E}_0 \cos(kx - \omega t) = \vec{E}_L(x, t) + \vec{E}_R(x, t), \\ \vec{E}_{R,L} &= \frac{\vec{E}_0}{2} \cdot e^{\pm i(kx - \omega t)}. \end{aligned} \quad (11.9)$$

Это означает, что фотон линейно-поляризованной волны есть суперпозиция лево- и право-циркулярно-поляризованных фотонов, каждый из которых несёт момент импульса (11.8). Просто в эксперименте эти фотоны появляются "по очереди" и, интерферируя (в смысле волновой функции!), дают линейно-поляризованную волну.

В природе существуют фотоны разных типов, которые определяются характером излучения атома – типом атомарного перехода (см. § 16.5). Как и электрон, фотон, взаимодействующий с атомом, обладает определённым моментом. Этот момент подчиняется всем, нам уже известным, правилам сложения моментов и вычисления их модулей (см. § 10.5). Кроме того, фотоны могут обладать разной чётностью $P = \pm 1$. В итоге различают

электродипольные фотоны: $J = S = 1, P = -1$,

магнитодипольные фотоны: $J = S = 1, P = +1$,

электроквадрупольные фотоны: $J = 2, P = +1$,

магнитоквадрупольные фотоны: $J = 2, P = -1$

и т.д., более высокой мультипольности.

§ 11.2. Оператор спина. Спин 1/2, спиноры

Состояние квантовой системы (например, частицы) зависит от ориентации её спина, если он ненулевой. Поэтому можно ввести в волновую функцию еще одну переменную, которая указывает на величину проекции спина на некоторое выделенное направление – ось z (см. § 10.2). Эту спиновую переменную s_z принято измерять в единицах числа \hbar . Тогда для случая $s = 1/2$, очевидно,

$$s_z = \pm 1/2 \quad (s = 1/2). \quad (11.10)$$

Функция $\psi(\vec{r}, t, s_z)$ описывает вероятность обнаружить частицу в состоянии с определенной ориентацией спина s_z :

$$P(s_z) = \int_V |\psi(\vec{r}, t, s_z)|^2 dV. \quad (11.11)$$

При этом в нормировке полной волновой функции учитываются все возможные направления вектора спина \vec{S} (проекции s_{α}):

$$\sum_{\alpha} \int_V |\psi(\vec{r}, t, s_{\alpha})|^2 dV = 1. \quad (11.12)$$

Для описания поведения частицы, обладающей спином, вводят соответствующий оператор – оператор спина \hat{S} , который, действуя на волновую функцию, "извлекает" из неё соответствующее собственное значение. Поясним это на примере частиц со спином 1/2 и этим случаем ограничимся.

Очевидно, что в квантовых системах со спином $s = 1/2$ возможны два состояния (11.10) ориентации спина относительно выбранного направления. Соответственно, $\psi(\vec{r}, t, s_{\alpha})$ состоит из двух независимых функций, т.е. имеет две

компоненты $\psi_1 (s_z = +1/2)$ и $\psi_2 (s_z = -1/2)$. Естественно представить такую функцию в виде столбца

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (11.13)$$

Эту величину называют *спинором* (по аналогии с вектором). По определению оператор спина отбирает из двух возможных ориентаций (проекций на ось z) "правильную" – т.е. действие этого оператора на ψ_1 даст $+\hbar/2$, а на ψ_2 даст $-\hbar/2$.

Поэтому можно представить оператор \hat{S}_z в виде матрицы

$$\hat{S}_z \psi = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar \cdot \begin{pmatrix} +1/2 \cdot \psi_1 \\ -1/2 \cdot \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (11.14)$$

Следовательно, как нетрудно сообразить, оператор \hat{S}_z есть

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11.15)$$

Две остальные компоненты оператора \hat{S} найдем, используя все тот же прием "физического измерения" (строгое доказательство требует привлечения более глубоко развитого математического формализма, нежели используемый в данном курсе). Пусть мы измерили значение проекции спина на ось x , зная, что в предыдущем измерении спин был ориентирован вдоль оси z так, что $s_z = +1/2$. Это означает, что теперь ось x играет роль оси z , т.е. мы повернули систему координат вокруг оси y так, что ось x заняла место оси z (рис. 11.2, б). Но, чтобы в нашем описании все было правильно, нужно действовать "по правилам" и вращать систему координат в положительном направлении, как показано на рисунке, от z к x . При этом, естественно, состояние физического объекта – спина частицы – не изменится, и в повернутой системе мы найдем

$$s_x = -\frac{1}{2},$$

т.е. состояние ψ_2 , а не ψ_1 .

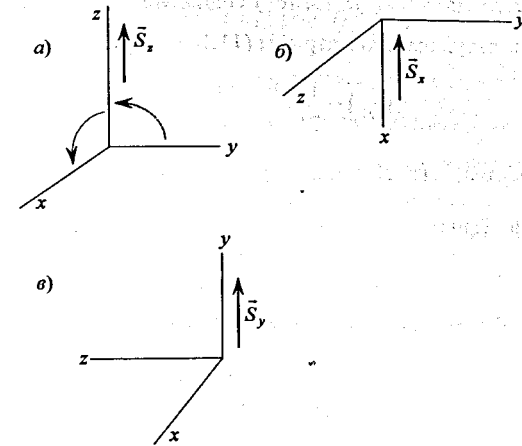


Рис. 11.2. Исходная (а) и повернутые (б, в) системы координат

Это рассуждение позволяет записать

$$\hat{S}_x \psi = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar \cdot \begin{pmatrix} +\frac{1}{2} \cdot \psi_2 \\ +\frac{1}{2} \cdot \psi_1 \end{pmatrix},$$

или

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (11.16)$$

т.е. в результате действия оператора S_x состояния ψ_1 и ψ_2 меняются местами.

Аналогичное "измерение" проекции спина на ось y эквивалентно повороту исходной системы вокруг оси x (пунктир на рис. 11.2, а) вращением от y к z .

Видим, что получается результат, совпадающий с результатом действия \hat{S}_z (11.14):

$$\hat{S}_y \psi = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar \cdot \begin{pmatrix} +\frac{1}{2} \cdot \psi_1 \\ -\frac{1}{2} \cdot \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (11.17)$$

Но это не означает, что матрицы (a_{ik}) и (c_{ik}) совпадают. Тот же результат (11.17) можно получить, используя вместо матрицы (11.14) например

$$(c_{ik}) = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Кроме того, мы помним, что волновые функции определены с точностью до фазового множителя (физический смысл несет $|\psi|^2$). Поэтому, работая в комплексных переменных, можно добавить множитель i так, чтобы получить правильное значение S^2 (см. задачу 11.2 ниже). Это дает

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (11.18)$$

Все вместе результаты (11.16)–(11.18) позволяют записать оператор спина в виде

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \cdot \hat{\sigma}, \quad (11.19)$$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Матрицы $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ называются *матрицами Паули*^{*)}.

Задача 11.2. Вычислить значение $|\hat{S}|^2$ для спина $1/2$.

Учитывая, что $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, найдем

$$(\hat{S})^2 \psi = \frac{\hbar^2}{4} (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \text{т.е. } S^2 = 3/4\hbar^2,$$

что совпадает с (11.2) при $s = 1/2$.

Естественно возникает вопрос, каким образом осуществить нормировку волновой функции, если она описывается в виде спиноров. Ограничимся рассмотрением случая спина $1/2$. Представим волновую функцию (11.13) в виде произведения двух функций – радиальной, $\psi(\vec{r}, t)$, и спиновой – спинора χ_1, χ_2

^{*)} Иногда в литературе спиновую переменную s_α обозначают также буквой σ , что может запутать читателя, которого и призовем к бдительности.

$$\psi(\vec{r}, t, s_\alpha) = \psi(\vec{r}, t) \cdot \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix},$$

где радиальная часть $\psi(\vec{r}, t)$ нормирована на единицу. Чтобы удовлетворить условию (11.12), нужно каким-то способом "образовать" квадрат модуля $\psi(\vec{r}, t, s_\alpha)$. Нетрудно догадаться, что это можно сделать, умножив спиновую часть ψ -функции на комплексно-сопряжённую ей и транспонированную, выбрав должным образом порядок сомножителей:

$$\sum_{\alpha=1}^2 \int |\psi(\vec{r}, t, s_\alpha)|^2 \cdot dV = \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 \cdot dV \cdot \begin{pmatrix} \chi_1^* & \chi_2^* \\ \chi_1 & \chi_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 \cdot dV \cdot (|\chi_1|^2 + |\chi_2|^2). \quad (11.20)$$

Заметим, что перемножение транспонированного столбца на столбец равносильно перемножению двух матриц, у первой из которых вторая строка нулевая, а у второй – нулевой второй столбец:

$$\begin{pmatrix} \chi_1^* & \chi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi_1^* & 0 \\ \chi_2^* & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\chi_1|^2 + |\chi_2|^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Потребовав, чтобы сомножители в последнем выражении в (11.20) по отдельности равнялись единице, приходим к условию нормировки спинора:

$$\begin{pmatrix} \chi_1^* & \chi_2^* \\ \chi_1 & \chi_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = |\chi_1|^2 + |\chi_2|^2 = 1.$$

Задача 11.3. Для частиц со спином $s = 1/2$ найти собственные функции оператора спина, описывающие состояния частицы с определённой проекцией спина на оси x, y, z системы координат ([8], задача 5.1).

Начнём с оператора \hat{S}_x , записав для него уравнение на собственные функции и собственные значения (8.16) с учётом (11.16):

$$\hat{S}_x \psi_{s_x} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi_{s_1}^* \\ \chi_{s_2}^* \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} \chi_{s_1}^* \\ \chi_{s_2}^* \end{pmatrix}, \quad s_x^{1,2} = s_{1,2} = \pm \frac{1}{2}.$$

Отсюда, перемножая матрицу на столбец и приравнявая соответствующие элементы столбцов, найдём

$$\frac{\hbar}{2} \chi_{s_1}^* = S_x \chi_{s_2}^*, \quad \frac{\hbar}{2} \chi_{s_2}^* = S_x \chi_{s_1}^*.$$

Это система двух линейных уравнений для неизвестных функций ψ_1 и ψ_2 :

$$S_x \chi_{s_1}^* - \frac{\hbar}{2} \chi_{s_2}^* = 0,$$

$$\frac{\hbar}{2} \chi_{s_1}^* - S_x \chi_{s_2}^* = 0.$$

Она имеет нетривиальное решение, если определитель этой системы равен нулю:

$$\begin{vmatrix} S_x & -\frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -S_x \end{vmatrix} = 0.$$

Отсюда

$$S_x = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

Тогда любое из уравнений системы даёт

$$\chi_{s_1}^* = \pm \chi_{s_2}^*.$$

По физическому смыслу функции $\chi_{s_1}^*$ и $\chi_{s_2}^*$ – константы (вероятность определённого значения S_x).

Из условия нормировки (11.20) получим

$$|\chi_{s_1}^*| = |\chi_{s_2}^*| = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Окончательно, "включив" физический смысл, найдём

$$\chi_{s_x=+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_{s_x=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (11.21)$$

Действительно, из соотношений (11.19) следует, что первая из этих функций даёт $S_x = \hbar/2$ ($s_x = 1/2$), а вторая – $S_x = -\hbar/2$ ($s_x = -1/2$).

Аналогично, используя значения двух остальных матриц Паули (11.19), найдём

$$\begin{aligned} \chi_{s_y=+1/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, & \chi_{s_y=-1/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \\ \chi_{s_z=+1/2} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \chi_{s_z=-1/2} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Отметим, что для описания спина с помощью спиноров в случае произвольного s операторы представляются в виде $(2s+1)$ -рядных матриц, а спинор-столбец имеет $2s+1$ элементов.

§ 11.3. Спин и магнитный момент частиц

Спин – собственный момент (собственное "вращение") частицы, а если вращающаяся частица имеет электрический заряд, то, согласно классической электродинамике, она должна обладать магнитным моментом. Например, равномерно заряженный шар радиусом R и массой m_0 , вращающийся с угловой скоростью $\vec{\omega}$ вокруг оси, совпадающей с одним из его диаметров, обладает магнитным моментом

$$\vec{\mu} = \frac{eR^2}{5c} \cdot \vec{\omega},$$

а его механический ("спиновый") момент равен

$$\vec{S} = \frac{2m_0R^2}{5} \cdot \vec{\omega}.$$

Подобные вращающиеся системы принято характеризовать *гиромагнитным отношением* G , определяемым как отношение магнитного момента физической системы к её механическому моменту:

$$\vec{\mu} = G \cdot \vec{S}. \quad (11.22)$$

Для равномерно заряженного шара постоянной плотности, вращающегося вокруг своего (любого) диаметра, гиромагнитное отношение равно

$$G_{\text{шара}} = e/2m_0c. \quad (11.23)$$

Такой же результат получим для сферической оболочки, полого и сплошного цилиндров и т. д. Вообще, в электродинамике доказывается теорема (см. [4], § 44), гласящая, что гиромагнитное отношение вращающейся системы зарядов, у которых отношение e/m одно и то же, равно (11.23), т.е. $e/2m_0c$. Подчеркнем, что если частицы, входящие в систему, имеют разные значения e/m_0 , то гиромагнитное отношение отлично от $e/2m_0c$. Например, две концентрические сферические оболочки, внешняя из которых (радиус R_1) состоит из электронов, а внутренняя (R_2) – из позитронов, образуют систему, у которой при вращении вокруг одного из диаметров

$$G = \frac{R_2^2 - R_1^2}{R_2^2 + R_1^2} \cdot \frac{e}{2m_e c}$$

(число электронов и позитронов одинаково и они равномерно распределены в оболочках). Здесь e , m_e – заряд и масса электрона.

В случае элементарных частиц картина еще сложнее. Так, спин электрона $S_e = \hbar/2$ и его гиромагнитное отношение

$$G_e \approx \frac{-e}{m_e c}$$

примерно вдвое больше, чем для равномерно заряженного вращающегося шара (11.23). Объяснение этому факту даёт квантовая электродинамика. Величину

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 9,274\,015\,4(31) \cdot 10^{-24} \text{ Дж/Тл} \approx 9,274 \cdot 10^{-21} \text{ эрг/Гс} \approx 5,788 \cdot 10^{-9} \text{ эВ/Гс}$$

называют *магнетон Бора*. Таким образом, магнитный момент электрона

$|\mu_e| \approx \mu_B$. Его экспериментальное значение равно (по абсолютной величине)

$$|\mu_e| = \frac{e\hbar}{2m_e c} \cdot \frac{g_e}{2}, \quad g_e = 2 \cdot (1 + 0,001\,159\,652\,202(\pm 231)),$$

т.е.

$$\mu_e = \frac{-e}{m_e c} \cdot \frac{g_e}{2} \cdot S_e \approx -\mu_B. \quad (11.24)$$

Цифры в скобках здесь и ниже дают ошибку эксперимента – в данном случае разброс трёх последних цифр. Магнитный момент нуклонов принято измерять в *ядерных магнетонах*

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c} \approx 5,05 \cdot 10^{-27} \text{ Дж/Тл} \approx 3,16 \cdot 10^{-12} \text{ эВ/Гс},$$

m_p – масса протона. В этих единицах магнитные моменты протона и нейтрона

$$\mu_p = 2,792\,763(30) \cdot \mu_N \approx 8,82 \cdot 10^{-12} \text{ эВ/Гс}, \quad \mu_n = -1,913\,15(7) \cdot \mu_N.$$

Эти результаты указывают на сложную структуру элементарных частиц.

Коэффициенты

$$g_p = 2 \cdot 2,792\,763 \quad \text{и} \quad g_n = 2 \cdot (-1,913\,15)$$

называются безразмерными гиромагнитными отношениями для протона и нейтрона соответственно.

Магнитный момент атомного ядра зависит, как нетрудно понять, от его строения – от того, как ориентированы в ядре спины и, соответственно, магнитные моменты его частиц – нуклонов. В общем случае магнитный момент ядра можно описывать выражением

$$\mu_{\text{nucl}} = \mu_N \cdot \frac{g_{\text{nucl}}}{2},$$

где g_{nucl} – безразмерное гиромагнитное отношение для ядра (табл. 14.1).

Важное свойство магнитного момента частиц – зависимость его направления от знака заряда частицы. У *положительно заряженных частиц магнитный момент направлен по спину, у отрицательно заряженных – против спина*. Это свойство магнитного момента легко прослеживается на модели вращающегося заряженного шара, представленной в начале параграфа (хотя эта модель, как было видно, и далека от реальности). Поэтому принято приписывать магнитному моменту тот же знак, что и знак заряда частицы.

Таблица 14.1. Квантовые характеристики простейших ядер

Ядро	Число протонов/нейтронов	Спин (в единицах)	$g_{\text{nucl}}/2$
^1_1H	1/0	1/2	+2,7928456
$^2_1\text{H} \equiv \text{D}$	1/1	1	+0,8574376
$^3_1\text{H} \equiv \text{T}$	1/2	1/2	+2,978960
^3_2He	2/1	1/2	-2,1277624
^4_2He	2/2	0	0
^6_3Li	3/3	1	+0,8220467
^7_3Li	3/4	3/2	+3,256424

§ 11.4. Уравнение Паули для заряженной частицы со спином в магнитном поле

В классической электродинамике на частицу, обладающую магнитным моментом $\vec{\mu}$ и находящуюся в магнитном поле \vec{B} , действует сила

$$\vec{F} = \nabla(\vec{\mu}, \vec{B}) = (\vec{\mu}, \nabla)\vec{B}, \quad (11.25)$$

которой соответствует потенциальная энергия

$$U(\vec{r}) = -(\vec{\mu}, \vec{B}(\vec{r})). \quad (11.26)$$

Поэтому ясно, что частица, обладающая спином и зарядом, будет также испытывать действие внешнего магнитного поля.

Последовательно квантовое описание движения релятивистской заряженной частицы дает уравнение Дирака (P.A.M. Dirac, 1928 г.). Знакомство с ним выходит за рамки курса и является предметом квантовой электродинамики (хотя с некоторыми следствиями из решений этого уравнения мы встретимся в дальнейшем^{*)}). Нерелятивистским пределом уравнения Дирака является уравнение Паули, которое описывает движение частицы со спином 1/2 во внешнем электромагнитном поле (W. Pauli, 1927 г.).

Это уравнение можно было бы записать "сразу", добавив в уравнение Шрёдингера (5.15) потенциальную энергию (11.26) и учтя, что волновая функция описывается теперь спинором (11.13). При этом, однако, возникает трудность, связанная с необходимостью учета влияния магнитного поля на орбитальное движение (траекторию) частицы. Здесь на помощь приходит форма записи уравнения Шрёдингера через оператор Гамильтона (см. (6.14), (6.15)). Из электродинамики известно, что при движении частицы в электромагнитном поле интегралом движения (при определенных условиях) являются компоненты обобщенного импульса

$$\vec{p}_B = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}, \quad (11.27)$$

где \vec{A} – вектор-потенциал электромагнитного поля. Это есть основание ("подсказка"!) для использования в уравнении Шрёдингера в качестве оператора обобщенного импульса того же оператора ∇ , что и для оператора импульса частицы вне магнитного поля:

$$\hat{p}_B = -i\hbar\nabla. \quad (11.28)$$

Подставляя это значение \vec{p}_B в (11.27), запишем выражение для оператора Гамильтона (6.15) частицы массой m_0 в электромагнитном поле:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \cdot \left(\hat{p}_B - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + eU = \frac{1}{2m_0} \left(i\hbar\nabla + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - (\hat{\mu}, \vec{B}) + e\varphi, \quad (11.29)$$

где φ – скалярный потенциал электрического поля, $\hat{\mu}$ – оператор магнитного момента, который, пользуясь понятием гиромангнитного отношения (11.22), можно представить в виде

$$\hat{\mu} = G\hat{S} \equiv \mu \frac{\hat{S}}{s\hbar}, \quad (11.30)$$

где \hat{S} – оператор спина, μ – магнитный момент частицы. Собственные значения оператора $\hat{\mu}_z$, очевидно, равны

$$\mu_z = \mu \frac{s_z}{s}.$$

Для электрона (см. (11.24))

$$\hat{\mu} = \mu_e \hat{\sigma}, \quad \mu_e = \frac{e\hbar}{2m_e c} \cdot \frac{g_e}{2}, \quad \mu_z = \pm \mu_e, \quad (11.31)$$

где $\hat{\sigma}$ – матрицы Паули (11.19). Подставив выражение для $\hat{\mu}$ (11.30) в (11.29) и полученный в результате гамильтониан в уравнение Шрёдингера, приходим к уравнению Паули:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\left(i\hbar\nabla + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m_0} \cdot \psi - \frac{\mu}{s\hbar} (\hat{S}, \vec{B}) \cdot \psi + e\varphi \cdot \psi. \quad (11.32)$$

Для электрона оператор \hat{S} выражается через матрицы Паули (11.19), и этот оператор $\hat{\sigma}$ обычно используют в традиционной форме записи уравнения Паули. Здесь ψ – спинор вида (11.13) или более сложного, если $s > 1/2$. Кроме того, заряд частицы здесь определен алгебраически (т.е. включая её знак), поэтому для электрона нужно подставить $-e$.

^{*)} Выше уже отмечалось, что уравнение Шрёдингера соответствует соотношению между энергией и импульсом нерелятивистской частицы (6.8). Для релятивистской частицы выражение для полной энергии (6.7) приводит к уравнению Клейна–Гордона–Фока (O. Klein, W. Gordon, V.A. Фок, E. Schroedinger, 1926 г.) для частицы с нулевым спином. Введение спина частицы и, соответственно, переход к спинорам, дают уравнение Дирака.

§ 11.5. Заряженная частица со спином

в однородном магнитном поле

Рассмотрим важный частный случай частицы в однородном магнитном поле \vec{B} . Обычно вектор-потенциал такого поля выбирают в виде [4]

$$\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{B}, \vec{r}], \quad \vec{B} = \overline{\text{const}}. \quad (11.33)$$

Однако в данной задаче, используя калибровочные преобразования,^{*)} удобнее привести вектор-потенциал к виду

$$A_x = -B \cdot y, \quad A_y = A_z = 0, \quad \vec{B} = \vec{e}_z B. \quad (11.34)$$

Выбирая ось z вдоль направления вектора \vec{B} , подчеркнем, что теперь это направление действительно выделено (см. § 10.2), тогда как положение осей x и y в плоскости, ортогональной \vec{B} , достаточно произвольно. В рассматриваемом случае электростатическое поле отсутствует, т.е. $\varphi = 0$.

Спиновая переменная s_z может принимать все возможные значения из ряда (сравни (10.15))

$$s_z = -s, -s+1, \dots, s. \quad (11.35)$$

Поэтому слагаемое, содержащее \hat{S} в (11.32), можно преобразовать следующим образом:

$$\left(\frac{\hat{S}}{s\hbar}, \vec{B} \right) \cdot \psi = \frac{1}{s\hbar} \cdot B \hat{S}_z \psi = \frac{s_z}{s} B \psi.$$

Для электрона множитель

^{*)} Напомним, что векторный потенциал определен с точностью до градиента произвольной скалярной функции координаты-времени, а скалярный потенциал — с точностью до ее производной по времени. Это означает, что потенциалы $\vec{A}(\vec{r}, t)$, $\varphi(\vec{r}, t)$ и $\vec{A}'(\vec{r}, t)$, $\varphi'(\vec{r}, t)$, связанные равенствами (см. [4])

$$\vec{A}'(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) + \nabla f(\vec{r}, t), \quad \varphi'(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t},$$

дают одни и те же значения \vec{E} и \vec{B} :

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot} [\vec{A}].$$

$$s_z/s = \pm 1. \quad (11.36)$$

Теперь уравнение для частицы со спином (11.32) для вектора-потенциала (11.34) принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m_0} \cdot \left\{ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB}{c} y \right)^2 - \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right\} \cdot \psi - \frac{s_z}{s} \mu_B \psi, \quad (11.37)$$

где μ – магнитный момент частицы. Ищем решение уравнения (11.37) в виде

$$\psi(x, y, z, t) = f(y) \cdot e^{i(p_x x + p_z z - Et)/\hbar}. \quad (11.38)$$

Прежде чем произвести подстановку (11.38) в (11.37), преобразуем первое слагаемое в фигурных скобках:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB}{c} y \right)^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2i\hbar \frac{eBy}{c} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \left(\frac{eB}{c} \right)^2 y^2.$$

Отсюда ясен выбор $\vec{A}(\vec{r})$ в форме (11.34): при таком выборе $\vec{A}(\vec{r})$ оператор импульса (т.е. оператор ∇) в операторе \hat{H} (11.29) не действует на вектор-потенциал. В этом случае говорят, что оператор \hat{H} и функция $\vec{A}(\vec{r})$ коммутативны. В общем случае

$$\left(\hat{p}_B - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi = \left(\hat{p}_B \right)^2 \psi - 2 \frac{e}{c} \left(\hat{p}_B, \vec{A} \right) \psi + \left(\frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi.$$

Второе слагаемое содержит выражение

$$\begin{aligned} \left(\hat{p}_B, \vec{A} \right) \psi &= \left(\hat{p}_B, \vec{A} \right) \psi + \left(\vec{A}, \hat{p}_B \right) \psi, \\ \left(\hat{p}_B, \vec{A} \right) &= -i\hbar (\nabla, \vec{A}) = -i\hbar \cdot \text{div} \vec{A}. \end{aligned}$$

Но в однородном поле $\text{div} \vec{A} = 0$:

$$\text{div} \left(\frac{1}{2} [\vec{B} \times \vec{r}] \right) = \frac{1}{2} (\nabla, [\vec{B} \times \vec{r}]) = (\vec{B} = \text{const}) = -\frac{1}{2} (\vec{B}, [\nabla \times \vec{r}]) = 0.$$

Подставив решение (11.38) в преобразованное уравнение и сократив экспоненту, получим уравнение для неизвестной функции $f(y)$:

$$\mathcal{E} \cdot f = \frac{1}{2m_0} \cdot \left\{ \left[p_x^2 + 2 \frac{p_x eBy}{c} + \left(\frac{eBy}{c} \right)^2 \right] \cdot f - \hbar^2 \frac{d^2 f}{dy^2} \right\} + \left(\frac{p_z^2}{2m_0} - \frac{s_z}{s} \cdot \mu B \right) \cdot f. \quad (11.39)$$

Теперь введем обозначения

$$\omega_B = \frac{e|B|}{m_0 c}, \quad y_0 = -\frac{p_x c}{eB}. \quad (11.40)$$

Тогда уравнение (11.39) можно преобразовать к виду

$$\frac{d^2 f}{dy^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot \left[\mathcal{E} + \frac{s_z}{s} \mu B - \frac{p_z^2}{2m_0} - \frac{m_0 \omega_B^2}{2} \cdot (y - y_0)^2 \right] \cdot f = 0. \quad (11.41)$$

Сравнивая это уравнение с (7.74), видим, что получилось по форме уравнение квантового осциллятора со смещенным равновесием y_0 , частотой ω_B и "эквивалентной" энергией

$$\mathcal{E}_{\text{equi}} = \mathcal{E} + \frac{s_z}{s} \mu B - \frac{p_z^2}{2m_0}.$$

Согласно (7.88)

$$\mathcal{E}_{\text{equi}} = \frac{\hbar \omega_B}{2} (2n + 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

откуда энергия частицы в магнитном поле равна

$$\mathcal{E} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \omega_B + \frac{p_z^2}{2m_0} - \frac{s_z}{s} \mu B. \quad (11.42)$$

Отметим, что для электрона

$$\frac{\mu_e}{s} = -\frac{e\hbar}{2m_e c} \cdot \frac{g}{2},$$

поскольку заряд электрона $-e$ (см. (11.24)).

Физический смысл выражения (11.42) понятен: первое слагаемое есть кинетическая энергия \mathcal{E}_\perp , связанная с движением частицы в плоскости, ортогональной полю, второе – кинетическая энергия свободного движения частицы вдоль поля, третье – потенциальная энергия частицы с магнитным моментом μ в магнитном поле B (напомним, что s_z может принимать значения (11.5)). Таким образом, значения \mathcal{E}_\perp квантованы, с шагом $\hbar \omega_B$ – это так

называемые *уровни Ландау* (Л.Д. Ландау, 1930 г.). Например, для электрона в магнитном поле 1 Тл (10^4 Гс) расстояния между уровнями составляют $\Delta \mathcal{E} \approx 10^{-4}$ эВ.

Константа y_0 также имеет ясный физический смысл – это радиус круговой (спиральной) траектории частицы с импульсом p_x в магнитном поле \vec{B} (рис. 11.3).

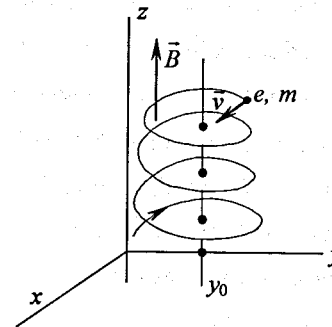


Рис. 11.3. Траектория заряженной частицы в магнитном поле $\vec{B} = \text{const}$

Конечно, более прозрачным было бы решение в цилиндрических координатах для потенциала (11.33), но оно гораздо более громоздко ([2], задача 1 к § 112).

Собственные функции $f(y)$ аналогичны функциям, полученным для квантового осциллятора (7.92).

§ 11.6. Электрически нейтральная частица со спином, покоящаяся в магнитном поле. Опыт Штерна–Герлаха

Если частица не несет электрического заряда, но обладает спином и, соответственно, магнитным моментом, в неоднородном магнитном поле на неё действует сила (11.25), пропорциональная произведению градиента поля и магнитного момента. В классической электродинамике такая частица смещается в направлении градиента поля, причем магнитный момент стремится сориентироваться параллельно вектору \vec{B} .

В квантовой механике частица со спином в магнитном поле может находиться в одном из состояний, в котором проекция спина на направление магнитного поля согласно (11.5), (11.35) имеет значение

$$S_z = s_z \hbar.$$

Выбрав ось z , "как и положено", вдоль вектора \vec{B} (выделенное направление!), получим, что величина этой проекции может изменяться только дискретно, с шагом $\Delta S_z = \hbar$. Это есть уже знакомое нам *квантование момента*. Поскольку по аналогии с орбитальным моментом (см. § 10.3) значения компонент S_x и S_y неопределённые, вектор спина может занимать в пространстве любое положение на поверхности конуса, ось которого совпадает с осью z , параллельной вектору \vec{B} (см. рис. 11.4). Это означает, что вектор спина (и магнитного момента) *прецессирует*, в классическом понимании, вокруг оси z . Частоту этой прецессии найдём из уравнения Паули (11.32), записав его для частицы с зарядом $e = 0$ и магнитным моментом μ для случая $\varphi = 0$. Получим

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi - \frac{\hat{S}_z}{s\hbar} \mu B \psi.$$

Для покоящейся частицы (т.е. в системе координат, связанной с частицей) ψ -функция не зависит, естественно, от координат, и поэтому $\Delta \psi = 0$. Соответственно имеем

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hat{S}_z}{s\hbar} \mu B \psi, \quad \hat{S}_z \psi = \hbar s_z \psi. \quad (11.43)$$

Замена частной производной по времени на полную здесь очевидна. Отсюда, как и ранее, найдём

$$\{\psi(t)\} = C e^{i\epsilon t/\hbar} \cdot \{\psi_n\}, \quad \text{где } \epsilon = \frac{s_z}{s} \cdot \hbar \omega_L \quad \text{и} \quad \omega_L = \frac{\mu B}{\hbar}, \quad (11.44)$$

ω_L — частота так называемой *ларморовской прецессии*, описанной английским физиком Лармором (*J. Larmor*, 1895 г.) для системы зарядов с одинаковым значением отношения заряда к массе в центрально-симметричном электрическом и слабом магнитном полях в классической электродинамике (см. [4], § 45).

Функции $\{\psi_n\}$ — спинор n -го ранга, зависящего от величины спина частицы (§ 11.2).

Для заряженной частицы со спином $1/2$ этот результат также применим в системе частицы. Подставив значение μ (11.24), получим

$$(\omega_L)_{s=1/2} = \frac{eB}{2m_0 c} \cdot \frac{g}{2}. \quad (11.45)$$

Обратим внимание, что для электрона эта частота примерно вдвое меньше частоты вращения в магнитном поле — так называемой *циклотронной частоты*^{*)}.

Величина $\mathcal{E} = \hbar \omega_L$ даёт значение энергии уровней частицы со спином, покоящейся в магнитном поле. В то же время в классической электродинамике известно, что магнитный момент частицы прецессирует в магнитном поле вокруг его направления с частотой ([4], § 45)

$$\vec{\Omega} = -G\vec{B}.$$

Для частицы со спином $1/2$ это даёт (см. (11.24))

$$|\vec{\Omega}| = \frac{eB}{m_0 c} \cdot \frac{g}{2} = 2(\omega_L)_{s=1/2}, \quad (11.46)$$

т.е. величину, вдвое большую частоты ларморовской прецессии ω_L (11.45). Этот же результат получается и в квантовой механике (см. задачу 11.4 ниже): *частота прецессии спина электрона* в магнитном поле почти равна ω_B — частоте его обращения в этом поле (11.40).

Задача 11.4. Найти закон изменения направления вектора спина частицы со спином $1/2$, покоящейся в магнитном поле \vec{B} .

Вспользуемся уравнением (8.37) и запишем его для оператора спина:

$$\frac{d\hat{S}}{dt} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \cdot \left\{ \hat{H} \cdot \hat{S} - \hat{S} \cdot \hat{H} \right\}.$$

Тогда, согласно равенству (8.32), имеем

^{*)} В современной литературе циклотронную частоту также нередко называют ларморовской, а круговую орбиту заряженной частицы в магнитном поле — *ларморовской окружностью*, её радиус — *ларморовским радиусом*, что, строго говоря, исторически некорректно. Причина такого "смещения понятий" кроется в близости $2\omega_L$ и ω_B для электрона.

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \left\langle \frac{\partial \vec{S}}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \left\langle \left\{ \hat{H}, \hat{S} - \hat{S} \cdot \hat{H} \right\} \right\rangle.$$

Значение вектора \vec{S} явно не зависит от времени, поэтому первое слагаемое равно нулю. Во второе слагаемое подставим значение оператора Гамильтона для частицы, покоящейся в магнитном поле (см. (11.43)),

$$\hat{H} = -\frac{\hat{S}_z}{\hbar} \cdot \mu B, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z, \quad s = \frac{1}{2},$$

и значение оператора \hat{S}_z (11.19). Запишем в явном виде среднее значение скобки Пуассона в выражении для $d\vec{S}/dt$:

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = -\frac{i\mu B}{2} \int \psi^*(\vec{r}, t, s_\alpha) \cdot \{\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x\} \cdot \psi(\vec{r}, t, s_\alpha) \cdot dV. \quad (11.47)$$

Теперь произведём вычисление скобки Пуассона покомпонентно (см. (11.18)):

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ -2 & 0 \end{pmatrix} = 2i\hat{\sigma}_y, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2i \\ 2i & 0 \end{pmatrix} = -2i\hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z &= 0. \end{aligned}$$

Тем самым получено важное свойство коммутаторов матриц Паули:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x &= 2i\hat{\sigma}_y, \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z &= -2i\hat{\sigma}_x. \end{aligned} \quad (11.48)$$

Подставляя эти значения коммутаторов в уравнение движения спина (11.47) и учитывая, что (см. (11.19) и (8.32))

$$\hat{S}_{x,y} = \frac{\hbar}{2} \cdot \hat{\sigma}_{x,y}, \quad \langle S_{x,y} \rangle = S_{x,y},$$

получим (см. (11.24))

$$\frac{dS_x}{dt} = \Omega \cdot S_y, \quad \frac{dS_y}{dt} = -\Omega \cdot S_x, \quad \frac{dS_z}{dt} = 0.$$

Отсюда находим

$$\ddot{S}_x + \Omega^2 S_x = 0, \quad \ddot{S}_y + \Omega^2 S_y = 0, \quad S_z = \text{const} = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

Для первых уравнения дают нам решение в виде

$$S_x^{(j)} = A_x \cos(\Omega t + \varphi_x), \quad S_y^{(j)} = A_y \cos(\Omega t + \varphi_y).$$

Если при $t = 0$ проекция спина на плоскость (x, y) направлена вдоль оси x , то

$$S_x(0) = A_x, \quad \varphi_x = 0, \quad S_y(0) = 0, \quad \varphi_y = -\frac{\pi}{2}.$$

Кроме того (см. § 10.3 и равенство (10.20)),

$$\sqrt{S_x^2(t) + S_y^2(t)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}.$$

Поскольку оси x и y равноправны, то $A_x = A_y = A$. Окончательно находим

$$S_x(t) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \cdot \cos \Omega t, \quad S_y(t) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \cdot \sin \Omega t, \quad S_z = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

Таким образом, вектор спина вращается (прецессирует) вокруг направления вектора \vec{B} с частотой Ω (11.46), а его проекция на плоскость (x, y) равна $\hbar/\sqrt{2}$.

Теперь посмотрим, как получить этот результат прямыми вычислениями интегралов в (11.47). Подставим туда значения коммутаторов (11.48):

$$\frac{dS_{x,y}}{dt} = \mu B \int \psi^*(\vec{r}, t, s_\alpha) \cdot \hat{\sigma}_{y,x} \cdot \psi(\vec{r}, t, s_\alpha) \cdot dV. \quad (11.49)$$

Выделим в волновой функции в явном виде спиновую часть (спинор):

$$\psi(\vec{r}, t, s_\alpha) = \psi_r(\vec{r}, t) \cdot \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$$

и учтём правило перемножения спинора и комплексно-сопряжённой ему величины (11.20). Кроме того, как и прежде, считаем, что оба сомножителя в этом выражении независимо нормированы на единицу, т.е.

$$\int \psi_r^* \psi_r dV = 1.$$

Тогда (11.49) для S_x можно преобразовать к виду

$$\frac{dS_x}{dt} = \mu B (\chi_1^* \chi_2^* - \chi_2^* \chi_1^*) \cdot \hat{\sigma}_y \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}.$$

Подставляя сюда значения матриц Паули (11.19) и собственные функции операторов \hat{S}_x и \hat{S}_y (задача 11.3), получим для $s_y = +1/2$

$$\frac{dS_x}{dt} = \mu B \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (1 - i) \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \mu B.$$

Учитывая, что

$$\mu B = \frac{eB}{m_0 c} \cdot \frac{g}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} = \Omega S_x,$$

приходим к первому из уравнений для $S_{x,y}$, полученных выше. Аналогично можно найти и остальные уравнения для S_x при $s_y = -1/2$ и для S_y при $s_x = +1/2$ и $-1/2$. Производная $\dot{S}_z = 0$, т.к. соответствующий коммутатор в (11.47), как показано выше, равен нулю.

Если спин частицы $s > 1/2$, величина σ пробегает, как уже сказано выше, ряд значений (11.35). Поэтому и частота ларморовской прецессии может принимать большее число значений, в соответствии с величиной проекции вектора \vec{S} на направление магнитного поля (рис. 11.4). Отметим, что разность энергий (11.44) для двух соседних уровней для частицы со спином $1/2$ равна ($\Delta s_z = 1$)

$$\Delta E_{n, n+1} = 2\hbar\omega_L = \hbar\Omega.$$

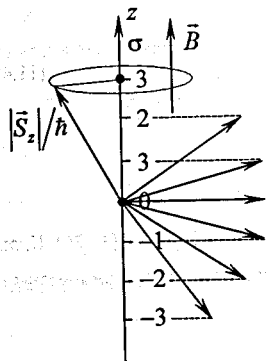


Рис. 11.4. Прецессия магнитного момента частицы в магнитном поле: случай $s = 3$, $\sigma = -3, -2, \dots, 3$,

$$|\vec{S}| = \hbar \cdot \sqrt{12}$$

Спиновая переменная σ есть аналог квантового числа m . Далее мы увидим (§ 18.3), что магнитный момент атома связан с его полным моментом J (11.3) и, соответственно, частота прецессии зависит от квантового числа m_J (11.6). Отсюда и название чисел m и m_J — магнитное квантовое число.

Квантование спина и магнитного момента частицы в магнитном поле было экспериментально продемонстрировано в опыте Штерна–Герлаха (O. Stern, W. Gerlach, 1922 г.). Поток атомов серебра, вылетающих из нагреваемого объема с тепловыми скоростями, пропускаться через неоднородное магнитное поле (рис. 11.5) и регистрировался на фотопластинке.

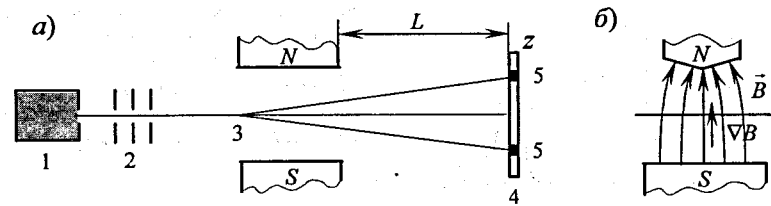


Рис. 11.5. Схема опыта Штерна–Герлаха (a).

1 — "печка" с порошком серебра; 2 — коллиматор; 3 — электромагнит с неоднородным полем; б) его поперечное сечение; 4 — фотопластинка; 5 — пятна почернения фотопластинки — следы осажденных на ней атомов серебра

В эксперименте поток расщеплялся на две части, что противоречит ожиданиям классической физики и подтверждает представления квантовой. Действительно, в потоке атомов начальное распределение спинов и, соответственно, магнитных моментов по направлениям — изотропное. Согласно классической электродинамике сила (11.23) равна

$$\vec{F} = \mu \cdot \cos\theta \cdot \nabla B, \quad B = |\vec{B}|, \quad 0 \leq \theta \leq \pi,$$

где θ — угол между векторами $\vec{\mu}$ и \vec{B} . Отсюда следует, что классические магнитные диполи смещаются вдоль градиента поля, проходя через магнит, и распределение плотности атомов серебра по фотопластинке в опыте Штерна–Герлаха должно было быть в этом случае непрерывным (пунктир на рис. 11.6). То, что в эксперименте наблюдались два пятна, смещенные от оси потока по и против направления градиента, подтверждает факт квантования момента ($\sigma = \pm 1/2$) атомов серебра. По величине смещения и известным значениям магнитного поля и его градиента была измерена величина магнитного момента атома серебра, оказавшаяся равной (примерно) магнетону Бора. Это означает, что спин и магнитный момент этих атомов определяются одним из электронов электронной оболочки (валентным — "неспаренным").

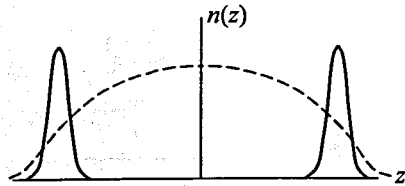


Рис. 11.6. Распределение плотности атомов серебра по пластинке – регистратору в опыте Штерна–Герлаха. Пунктир – распределение классических диполей, сплошные кривые – распределение атомов серебра, наблюдавшееся в эксперименте

Опыт Штерна–Герлаха считается одним из фундаментальных экспериментов в квантовой механике, а использовавшийся в нем метод разделения атомов в неоднородном магнитном поле широко используется с тех пор в физике и технике. В частности, он был применен в первом квантовом генераторе (Н.Г. Басов, А.М. Прохоров, 1954 г.).

Задача 11.5. Оценить параметры опыта Штерна–Герлаха.

Сила (11.25), действующая на атом с магнитным моментом μ в неоднородном магнитном поле \vec{B} , сообщает атому приращение импульса вдоль вектора ∇B :

$$\Delta \vec{p} = \mu \cdot \cos \theta \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \nabla B \cdot dx.$$

Если скорость атома $\vec{v} \perp \vec{B}$, а вектор $\nabla B \parallel \vec{B}$, то приближенно

$$\Delta p_{\perp} \equiv (\Delta \vec{p})_{\perp} \approx \frac{\mu \cdot G_B \cdot L_{\text{eff}}}{v},$$

где L_{eff} – эффективная протяженность поля вдоль оси x , а G_B – среднее значение градиента на этой длине:

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} \nabla B \cdot dx \right| = G_B \cdot L_{\text{eff}}.$$

Смещение атома от оси пучка на экране (фотопластинка на рис. 11.5) равно

$$\Delta z = \alpha \cdot L, \quad \alpha = \frac{\Delta p_{\perp}}{p},$$

где L – расстояние от магнита до экрана. Таким образом,

$$\Delta z = \frac{\mu \cdot G_B \cdot L_{\text{eff}}}{pv} \cdot L.$$

Эффект квантования будет различим, если

$$\Delta z \cdot \Delta p_{\perp} \geq \hbar.$$

Подставляя сюда значения Δp_{\perp} и Δz , получим условие квантования:

$$G_B \geq \frac{v}{\mu} \cdot \sqrt{\frac{p \cdot \hbar}{L}} = \frac{v^{3/2}}{\mu \cdot L_{\text{eff}}} \cdot \sqrt{\frac{Am_p \hbar}{L}}.$$

Здесь A – атомный вес серебра, m_p – масса протона. Принимая температуру атомов серебра равной $T_{\text{Ag}} = 1500$ К (несколько выше точки плавления) и учитывая, что в нашем случае

$$Am_p v^2 = T_{\text{Ag}},$$

запишем условие в форме

$$G_B \gg \frac{T_{\text{Ag}}^{3/4}}{\mu \cdot L_{\text{eff}} (A \cdot m_p c^2)} \cdot \sqrt{\frac{\hbar c}{L}}.$$

Выбрав параметры рассматриваемого опыта $T = 1500$ К $\approx 0,16$ эВ, $L_{\text{eff}} = 10$ см, $L = 50$ см, $|\mu| = \mu_B \approx 5,8 \cdot 10^{-5}$ эВ/Тл, найдём $G_B \geq 15$ Гс/см, что легко выполняется. При этом

$$\alpha = \frac{\mu \cdot G_B \cdot L_{\text{eff}}}{T_{\text{Ag}}} \approx 3,6 \cdot 10^{-6} \text{ рад}, \quad \Delta z \approx 3,6 \text{ мкм}.$$

Поток атомов серебра должен иметь даже меньшую угловую расходимость, чтобы различить два максимума почернения на фотопластинке. Выполнить это условие практически невозможно. Поэтому выбор параметров градиента поля определяется условиями:

$$\alpha > \alpha_{\text{collimator}} \sim 10^{-3} \text{ рад},$$

что требует

$$G_B \sim 5 \text{ кГс/см}.$$

В этом случае на экране, отстоящем на $L \sim 1$ м от магнита, образуются два пятна серебра размером порядка 1 мм и отстоящие друг от друга на расстояние $2 \cdot \Delta z \sim 2$ мм.

ГЛАВА 12. ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

§ 12.1. Принцип неразличимости тождественных частиц

Соотношения неопределенностей запрещают одновременное и точное измерение координат и импульса частицы. А это означает невозможность введения в квантовой механике понятия траектории частиц. Поэтому невозможно проследить за судьбой каждой из частиц, составляющих квантовую систему. Отсюда следует *принцип неразличимости* одинаковых частиц – мы не можем сказать, положение и импульс какой из двух (нескольких) одинаковых частиц мы измерили, поскольку каждая из них может оказаться в данной точке пространства и с данным импульсом с конечной вероятностью. Поэтому также нельзя определить волновую функцию одной заданной частицы, входящей в систему, – можно говорить только о волновой функции системы в целом.

Начнем со случая простейшей системы из двух одинаковых частиц. Если их взаимодействие пренебрежимо мало, то, как и в § 10.5, волновая функция системы равна произведению волновых функций частиц (см. (10.35)). В предыдущем параграфе мы уже говорили о существовании двух типов частиц: бозонов – частиц с целым спином, и фермионов – частиц с полуцелым спином. В релятивистской квантовой теории показывается (это следует из *уравнения Дирака*), что частицы с полуцелым спином описываются волновой функцией, которая антисимметрична к перестановке двух частиц – меняет знак при такой перестановке. Волновая функция системы частиц с целым спином симметрична к такой перестановке. Поясним это на примере двух частиц.

Из волновой функции (10.35) можно образовать простейшую антисимметричную комбинацию

$$\psi_{12}(\xi_1, \xi_2, t) = C \cdot [\psi_1(\xi_1) \cdot \psi_2(\xi_2) - \psi_1(\xi_2) \cdot \psi_2(\xi_1)], \quad (12.1)$$

где

$$\xi = \{\vec{p}, \vec{r}, \sigma\}$$

– набор компонент импульса и радиуса-вектора и спиновая переменная каждой из частиц; переменная t в выражении справа и далее опущена для краткости записи. Очевидно,

$$\psi_{12}(\xi_1, \xi_2) = -\psi_{12}(\xi_2, \xi_1), \quad (12.2)$$

т.е. перестановка частиц меняет знак функции. Константу C найдём из условия нормировки, считая, что функции ψ_1 и ψ_2 ортонормированы:

$$\begin{aligned} |\psi_{12}|^2 &= |C|^2 [\psi_1(\xi_1) \cdot \psi_2(\xi_2) - \psi_1(\xi_2) \cdot \psi_2(\xi_1)] \times \\ &\times [\psi_1^*(\xi_1) \psi_2^*(\xi_2) - \psi_1^*(\xi_2) \cdot \psi_2^*(\xi_1)] = \\ &= |C|^2 \{ |\psi_1(\xi_1)|^2 - \psi_1(\xi_1) \psi_2^*(\xi_1) \cdot \psi_2(\xi_2) \cdot \psi_1^*(\xi_2) - \\ &- \psi_1(\xi_2) \cdot \psi_2^*(\xi_2) \cdot \psi_2(\xi_1) \cdot \psi_1^*(\xi_1) + |\psi_1(\xi_2)|^2 \cdot |\psi_2(\xi_1)|^2 \}. \end{aligned} \quad (12.3)$$

Далее воспользуемся свойством ортонормированности функций $\psi_1(\xi)$ и $\psi_2(\xi)$ (8.18):

$$I_{1,2} = \int_{V_\xi} \psi_1(\xi) \cdot \psi_2^*(\xi) dV_\xi = \delta_{1,2},$$

где V_ξ – область изменения (*фазовый объём*) набора параметров ξ . Элемент этого объёма, очевидно, есть

$$dV_\xi = d^3 p \cdot d^3 r,$$

а интеграл по $d\sigma$ есть сумма всех возможных состояний, отличающихся значениями переменной σ . Например, для $\sigma = \pm 1/2$ имеем

$$I_{12} = I_{12}(\sigma = +1/2) + I_{12}(\sigma = -1/2).$$

С учётом этих свойств волновых функций $\psi_1(\xi)$ и $\psi_2(\xi)$ из (12.3) получим

$$|C|^2 \cdot \int_V |\psi_{12}|^2 \cdot dV_1 dV_2 = 2|C|^2,$$

откуда

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Аналогично, симметричная комбинация функций ψ_1 и ψ_2 может быть представлена в простейшей форме

$$\psi_{12}(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\xi_1) \cdot \psi_2(\xi_2) + \psi_1(\xi_2) \cdot \psi_2(\xi_1)].$$

Окончательно для системы из двух частиц имеем

$$\psi_{12}(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\xi_1) \cdot \psi_2(\xi_2) \pm \psi_1(\xi_2) \cdot \psi_2(\xi_1)], \quad (12.4)$$

где верхний знак соответствует бозонам, а нижний – фермионам.

В общем случае системы из N -бозонов

$$\psi_N = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\alpha=1}^M [\psi_1(\xi_1) \cdot \psi_2(\xi_2) \cdot \dots \cdot \psi_N(\xi_N)]_{\alpha}, \quad (12.5)$$

где сумма берётся по всем возможным перестановкам частиц.

Для фермионов произведения под знаком суммы (12.5) должны менять знак при любой перестановке двух частиц:

$$\begin{aligned} \psi_1(\xi_1) \cdot \psi_2(\xi_2) \cdot \dots \cdot \psi_n(\xi_\alpha) \cdot \dots \cdot \psi_m(\xi_\beta) \cdot \dots \cdot \psi_N(\xi_N) = \\ = -\psi_1(\xi_1) \cdot \psi_2(\xi_2) \cdot \dots \cdot \psi_n(\xi_\beta) \cdot \dots \cdot \psi_m(\xi_\alpha) \cdot \dots \cdot \psi_N(\xi_N). \end{aligned}$$

Нетрудно сообразить, что этому условию удовлетворяет волновая функция, представленная в виде детерминанта, в строках которого изменяется номер частицы, а в столбцах – номер ψ -функции (номер состояния):

$$\psi_N = \frac{1}{\sqrt{N!}} \times \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \dots & \psi_1(\xi_N) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_2(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_N(\xi_1) & \psi_N(\xi_2) & \dots & \psi_N(\xi_N) \end{vmatrix}. \quad (12.6)$$

§ 12.2. Принцип Паули

Из выражения (12.6) немедленно следует важнейший квантово-механический принцип (*W. Pauli*, 1925 г.): в системе из *одинаковых фермионов* (две (или более) частицы не могут одновременно находиться в одном и том же квантовом состоянии).

Действительно, если два из возможных состояний частиц α и β совпадают, т.е.

$$\psi_\alpha(\xi_i) = \psi_\beta(\xi_i), \quad i = 1, 2, \dots, N - \text{номер состояния,}$$

в определителе (12.6) появляются две одинаковые строки и он, а стало быть, и ψ_N обращаются в нуль. Для бозонов такого запрета нет.

Этот принцип, сформулированный Паули для объяснения структуры атомов ("принцип запрета" для электронов), был доказан им на основе уравнения Дирака в 1940 г. также и для любых фермионов.

Отметим, что из принципа Паули следует существование двух типов статистик, о которых сказано выше (§ 11.1).

§ 12.3. Обменное взаимодействие

В системах из тождественных частиц появляется особый вид взаимодействия, имеющий чисто квантово-механическое происхождение и связанный с операцией перестановки частиц. Продемонстрируем это на примере *двух заряженных фермионов*.

Будем считать, что их взаимодействие достаточно слабое, так что можно воспользоваться выражением (12.4), считая частицы квазинезависимыми (как бы независимыми). Кроме того, учтём, что электрическое поле заряженных фермионов не зависит от направления их спинов. Поэтому, в соответствии со сказанным в § 11.2, волновую функцию системы можно представить в виде произведения *координатной* и *спиновой функций*:

$$\psi_{12}(\xi_1, \xi_2) = \varphi_{12}(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2) \cdot \chi(\sigma_1, \sigma_2),$$

где \vec{r}, \vec{p}, σ – радиус-вектор, импульс и спиновая переменная частицы. Полная волновая функция ψ_{12} , в соответствии с принципом Паули, должна быть антисимметрична: два фермиона не могут находиться в состояниях с одинаковыми значениями всех переменных \vec{r}, \vec{p}, σ . Отсюда следует, что в состоянии с "параллельными" спинами ($\sigma_1 = \sigma_2$) функция φ_{12} должна обращаться в нуль при $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ и $\vec{p}_1 = \vec{p}_2$, т.е. она антисимметрична, а $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ в этом случае симметрична (иначе ψ_{12} не будет антисимметричной). В случае

"антипараллельных" спинов ($\sigma_1 = -\sigma_2$), соответственно, $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ антисимметрична, φ_{12} симметрична и оба фермиона могут одновременно иметь одинаковые координаты и импульсы. Таким образом, имеем

$$\varphi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \times \{ \varphi_1(\zeta_1) \cdot \varphi_2(\zeta_2) \pm \varphi_1(\zeta_2) \cdot \varphi_2(\zeta_1) \},$$

где знак "+" при $\sigma_1 = -\sigma_2, s = 0$,
знак "-" при $\sigma_1 = \sigma_2, s = 1$.

(12.7)

Здесь s – суммарный спин (спиновое квантовое число!) системы, ζ – набор координат и компонент импульсов частиц.

Вычислим теперь среднее значение энергии электромагнитного взаимодействия двух фермионов:

$$\langle U \rangle = \int_V \varphi_{12}^* \cdot \frac{e^2}{r_{12}} \cdot \varphi_{12} \cdot dV_1 \cdot dV_2.$$
(12.8)

Здесь r_{12} – расстояние между частицами. Подставив сюда (12.7), найдём

$$\langle U \rangle = U_0 \pm \mathcal{E}_{tr}, \text{ "+" при } s = 0, \text{ "-" при } s = 1,$$

$$U_0 = e^2 \int_V \frac{|\varphi_1(\zeta_1)|^2 \cdot |\varphi_2(\zeta_2)|^2}{r_{12}} \cdot dV_1 \cdot dV_2,$$

$$\mathcal{E}_{tr} = e^2 \int_V \frac{\varphi_1(\zeta_1) \cdot \varphi_2^*(\zeta_1) \cdot \varphi_1^*(\zeta_2) \cdot \varphi_2(\zeta_2)}{r_{12}} \cdot dV_1 \cdot dV_2.$$
(12.9)

(Индекс tr – от англ. *transposition* – перестановка). Таким образом, энергия взаимодействия двух фермионов состоит из двух частей. Первая, U_0 , соответствует классической энергии взаимодействия двух заряженных тел с плотностями зарядов $e \cdot |\varphi_1(\zeta_1)|^2$ и $e \cdot |\varphi_2(\zeta_2)|^2$. Вторая, \mathcal{E}_{tr} , появляется в результате учёта влияния спина на вид волновой функции. Хотя прямо спины частиц не участвуют в электростатическом взаимодействии, косвенно они влияют на величину энергии взаимодействия:

$$\langle U \rangle_{s=0} - \langle U \rangle_{s=1} = 2\mathcal{E}_{tr}.$$

Подчеркнём, что обменное взаимодействие – часть одного из фундаментальных взаимодействий. В рассмотренном примере оно является частью электромагнитного ("электростатического") взаимодействия.

Наиболее известными и важными случаями проявления обменного взаимодействия является ковалентная связь в молекулах и ферромагнетизм и "ферроэлектричество". Эти явления рассматриваются в курсе физики твёрдого тела.

Следует заметить, что обменное взаимодействие действует не только между тождественными частицами. Оно проявляется, вообще говоря, в системе с двумя (по крайней мере) вырожденными состояниями.

ГЛАВА 13. ЭЛЕКТРОН В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

§ 13.1. Уравнение Шрёдингера для задачи двух тел

В классической механике задача о взаимодействии двух тел сводится, как известно, к задаче о движении частицы с *приведённой массой*^{*)} (см. [1], § 4.2)

$$m_0 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (13.1)$$

в поле центральной силы $\vec{F}(\vec{r}_{12})$, если сила взаимодействия между частицами направлена вдоль прямой, их соединяющей, и зависит только от расстояния между частицами \vec{r}_{12} (рис. 13.1):

$$\begin{aligned} \vec{r}_{12} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \equiv \vec{r}, \\ \vec{F}_{12}(\vec{r}_{12}) &= -\vec{F}_{21}(\vec{r}_{12}) = \frac{\vec{r}_{12}}{r_{12}} \cdot |\vec{F}_{12}(\vec{r}_{12})|. \end{aligned} \quad (13.2)$$

Подчеркнём, что вектор \vec{r}_{12} направлен от частицы 2 к частице 1. Соответственно, потенциальная энергия взаимодействия в этом случае является функцией радиуса-вектора \vec{r}_{12} :

$$U_{12}(\vec{r}_{12}) = U_{21}(\vec{r}_{12}) \equiv U(\vec{r}). \quad (13.3)$$

Центр масс частиц находится в точке C (рис. 13.1) с координатами \vec{r}_c и движется со скоростью \vec{V}_c , определяемой суммарным импульсом частиц:

$$\begin{aligned} r_c &= \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \\ \vec{V}_c &= \frac{m_1 \dot{\vec{r}}_1 + m_2 \dot{\vec{r}}_2}{m_1 + m_2} = \frac{\vec{p}_1 + \vec{p}_2}{m_1 + m_2}. \end{aligned} \quad (13.4)$$

^{*)} Reduced mass (англ.)

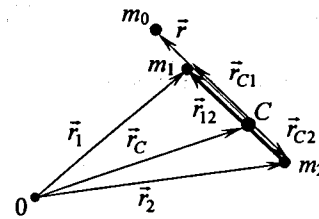


Рис. 13.1. Положение взаимодействующих тел и тела с приведённой массой: \vec{r}_{12} — радиус-вектор из m_2 в m_1 , $|\vec{r}_{12}| = r$, \vec{r} — радиус-вектор из центра масс C в точку, где находится тело с приведённой массой

Точка C находится на прямой $m_1 m_2$ (т.е. на векторе \vec{r}_{12}), что следует из значения векторов $\vec{r}_{C1}, \vec{r}_{C2}$, соединяющих точки C и m_1, m_2 :

$$\vec{r}_{C1} = \vec{r}_1 - \vec{r}_C = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \cdot \vec{r}, \quad \vec{r}_{C2} = \vec{r}_2 - \vec{r}_C = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \cdot \vec{r}. \quad (13.5)$$

В квантовой механике поведение двух частиц, взаимодействующих по закону (13.2), (13.3), описывается волновой функцией системы. Она подчиняется уравнению Шрёдингера (6.15), (8.14), в котором оператор Гамильтона (8.15) содержит операторы импульсов взаимодействующих частиц:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(\vec{r}_{12}). \quad (13.6)$$

Это уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2} \cdot \left(\frac{1}{m_1} \cdot \Delta_1 \Psi + \frac{1}{m_2} \cdot \Delta_2 \Psi \right) + U(\vec{r}) \Psi, \\ \Delta_1 &= \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}, \quad \Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}. \end{aligned} \quad (13.7)$$

Переходя к переменным \vec{r}_c (13.4) и $\vec{r} \equiv \vec{r}_{12}$ (13.2), вычислим соответствующие производные волновой функции, представив её в виде

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \psi(\vec{r}, t) \cdot f(\vec{r}_c, t), \quad \vec{r} = \{x, y, z\}, \quad \vec{r}_c = \{x_c, y_c, z_c\}. \quad (13.8)$$

Вычислим производную по x_1 в первом лапласиане в (13.7):

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \cdot \left(\frac{\partial x}{\partial x_1} \right)^2 \cdot f + 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial f}{\partial x_c} \cdot \frac{\partial x_c}{\partial x_1} + \psi \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial x_c^2} \cdot \left(\frac{\partial x_c}{\partial x_1} \right)^2.$$

Из определения \vec{r} и \vec{r}_c следует

$$\frac{\partial x}{\partial x_1} = -1, \quad \frac{\partial x_C}{\partial x_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2}. \quad (13.9)$$

Аналогично вычисляются производные по y_1, z_1 , а также по координатам второй частицы во втором лапласиане. При этом

$$\frac{\partial x}{\partial x_2} = 1, \quad \frac{\partial x_C}{\partial x_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}$$

и т. д. В результате сумма в скобках в (13.7) преобразуется к виду

$$\left(\frac{\Delta_1}{m_1} + \frac{\Delta_2}{m_2} \right) \cdot \psi = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \cdot \Delta_r \psi(\vec{r}) \cdot f(\vec{r}_C) + \frac{1}{m_1 + m_2} \cdot \psi(\vec{r}) \cdot \Delta_C f(\vec{r}_C),$$

где лапласианы Δ_r и Δ_C содержат производные по координатам \vec{r} и \vec{r}_C . Подставив это выражение в уравнение (13.7), получим

$$i\hbar \cdot \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \cdot f + \psi \frac{\partial f}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot \Delta_r \psi \cdot f - \frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \cdot \psi \cdot \Delta_C f + U(\vec{r}) \cdot \psi \cdot f = 0. \quad (13.10)$$

Естественно предположить, что

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\mathcal{E}t/\hbar}, \quad f(\vec{r}_C, t) = f(\vec{r}_C) \cdot e^{-i\mathcal{E}_C t/\hbar},$$

где \mathcal{E} — энергия частиц в системе центра масс (точнее — энергия движения частицы с приведённой массой m_0), \mathcal{E}_C — энергия движения системы как целого (частица с массой $m_1 + m_2$). Подставим эти функции в (13.10), сократим экспоненты и поделим обе части уравнения на $\Psi = \psi(\vec{r}) \cdot f(\vec{r}_C)$. Относя в левую часть уравнения функции аргумента r , а в правую — аргумента r_C , получим равенство

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot \frac{\Delta_r \psi}{\psi} + \mathcal{E}_r - U(\vec{r}) = - \left[\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \cdot \frac{\Delta_C f}{f} + \mathcal{E}_C \right]. \quad (13.11)$$

Поскольку в левой и правой частях этого равенства стоят функции разных независимых переменных \vec{r} и \vec{r}_C , оно выполняется только в одном случае, когда обе его части равны одной и той же константе. Величину этой константы найдём, подставив в правую часть $f(\vec{r}_C)$ в виде волны де Бройля (свободное движение центра масс!):

$$f(\vec{r}_C) = A e^{i(\vec{p}_C \vec{r}_C)/\hbar}.$$

Получим

$$\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \cdot \frac{\Delta_C f}{f} + \mathcal{E}_C = -\frac{p_C^2}{2(m_1 + m_2)} + \mathcal{E}_C.$$

Ясно, что эта величина равна нулю, т. к.

$$\mathcal{E}_C = \frac{p_C^2}{2(m_1 + m_2)} \quad (13.12)$$

есть энергия свободно движущейся частицы с массой $m_1 + m_2$ и импульсом \vec{p}_C , который равен сумме импульсов частиц, постоянной во времени (закон сохранения полного импульса замкнутой системы):

$$\vec{p}_C = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \text{const} \quad (13.13)$$

(см. также задачу 13.1). Соответственно, уравнение, описывающее поведение функции $\psi(\vec{r})$, получим, приравняв нулю левую часть равенства:

$$\Delta_r \psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot [\mathcal{E}_r - U(\vec{r})] \cdot \psi = 0. \quad (13.14)$$

Что же даёт нам знание функций $\psi(\vec{r}, t)$ и $f(\vec{r}_C, t)$?

Прежде всего, заметим, что к уравнению (13.14) мы придём и в случае, когда система из двух взаимодействующих частиц находится в поле внешних сил — достаточно однородном, чтобы изменением поля на размере системы можно было пренебречь. Тогда в правой части уравнения (13.11) появится ещё одно слагаемое — потенциальная энергия $U(\vec{r}_C)$ в поле внешних сил. (В этом отношении квантово-механическая задача полностью аналогична классической — разделение задачи на две независимые части, "внутреннюю" и "внешнюю"). Знание функции $f(\vec{r}_C, t)$ вообще не требуется, если "договориться" нормировать обе функции, ψ и f , независимо на единицу. Тогда

$$dP = \left[\int_V \Psi(\vec{r}, \vec{r}_C, t)^2 \cdot d^3 r_C \right] \cdot d^3 r = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \cdot d^3 r$$

есть вероятность обнаружить систему из двух взаимодействующих частиц в положении, соответствующем ориентации и величине вектора \vec{r} . Тем самым задача двух тел и в квантовой механике свелась к задаче о движении тела с приведённой массой (13.1) в поле силы взаимодействия частиц. Отметим также, что центральный характер силы взаимодействия использован при анализе равенства (13.11): $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U(r)$ (см. (13.2)).

Задача 13.1. Получить уравнение (13.14), воспользовавшись законом преобразования импульса при переходе в систему центра масс.

Скорость центра масс (13.5) есть

$$\vec{V}_c = \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{m_1 + m_2}.$$

Тогда импульсы частиц 1, 2 в системе центра масс есть

$$(\vec{p}_1)_r = m_1(\vec{v}_1 - \vec{V}_c) = m_0(\vec{v}_1 - \vec{v}_2) = -(\vec{p}_2)_r \equiv \vec{p},$$

где

$$\vec{p} = m_0 \dot{\vec{r}}.$$

Таким образом, задача об относительном движении частиц в системе центра масс свелась к задаче о движении частицы с приведённой массой в поле сил с потенциалом $U(\vec{r})$. Отсюда

$$H(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m_0} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_r + U(\vec{r}). \quad (13.15)$$

Подставляя этот гамильтониан в (6.14), придём к уравнению (13.14).

§ 13.2. Атом водорода. Электрон в центральном поле

Очень часто, рассматривая движение электрона в атоме, ядро считают бесконечно тяжёлым, совмещая с ним центр масс системы электрон-ядро. На самом деле, как показано в предыдущем параграфе, задача о взаимодействии электрона с ядром сводится к задаче о движении тела с приведённой массой m_0 (13.1) в кулоновском поле точечного заряда Ze :

$$U(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (13.16)$$

Здесь учтено, что заряд электрона равен $-e$, а заряд ядра или иона, в поле которого движется внешний электрон, равен Ze . Отличие m_0 от массы электрона приводит к вполне измеряемому эффекту в спектре атома — это так называемый *изотопический сдвиг* (см. (13.34) ниже).

Поле точечного заряда (13.16) является центральным: вектор напряжённости поля направлен в точку, где находится заряд, создающий это поле:

$$\vec{E} = \frac{Ze}{r^2} \cdot \frac{\vec{r}}{r}. \quad (13.17)$$

Центр (полос) поля в задаче двух тел находится в точке центра масс тел (см. (13.4) и рис. 13.1), а частица с приведённой массой движется в этом поле в соответствии с уравнением

$$m_0 \ddot{\vec{r}} = e\vec{E}. \quad (13.18)$$

Напомним, что в классической механике *момент импульса в поле центральных сил сохраняется*:

$$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}] = \text{const}. \quad (13.19)$$

Это следует из равенства нулю момента центральной силы относительно центра поля:

$$[\vec{E}, \vec{r}] \propto [\vec{r}, \vec{r}] \equiv 0.$$

В квантовой механике роль уравнения движения (13.18) играет уравнение Шрёдингера. В задаче о движении в центральном поле естественно выбрать начало отсчёта в точке центра масс C и использовать сферическую систему координат с отсчётом полярного угла θ и азимутального угла φ от произвольно выбранных (пока!), но фиксированных направлений декартовой системы координат с нулём в той же точке C (рис. 13.2). Тогда уравнение Шрёдингера для частицы с приведённой массой m_0 принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \right) \psi + U(r) \cdot \psi, \quad (13.20)$$

где $\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$ — радиальная часть лапласиана, $\Delta_{\theta, \varphi}$ — угловая (10.11).

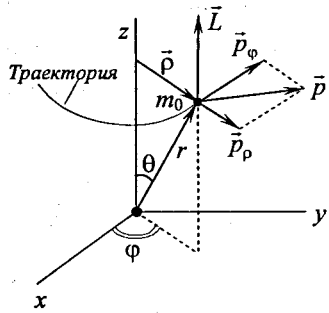


Рис. 13.2. Траектория частицы в центральном поле

Будем искать решение в виде

$$\psi(\vec{r}, t) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) \cdot e^{-i\epsilon t/\hbar} \quad (13.21)$$

После подстановки (13.21) в (13.20) и разделения переменных (делением обеих частей уравнения на $R Y$ и перегруппировки) найдём

$$r^2 \left\{ \frac{\Delta_r R}{R} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot [\epsilon - U(r)] \right\} = -\frac{\Delta_{\theta, \varphi} Y}{Y} \quad (13.22)$$

Как уже не однажды было выяснено, это равенство выполняется, если обе его части, содержащие функции независимых переменных, равны одной и той же константе. Тогда уравнение для $Y(\theta, \varphi)$ совпадает с уравнением на собственное значение оператора момента импульса (10.21)–(10.27), решением которого являются шаровые функции (10.29)–(10.31). В этом нет ничего удивительного, т.к. оператор Гамильтона для частицы в центральном поле содержит оператор квадрата момента импульса (задача 13.2). Таким образом, "угловая" часть решения нам уже известна.

Задача 13.2. Получить уравнение (13.20), пользуясь оператором Гамильтона для частицы в центральном поле.

В центральном поле траектория частицы является плоской, что следует из закона сохранения момента импульса частицы в центральном поле (13.19) (направление вектора момента, а стало быть, и направление оси, вокруг которой вращается частица, неизменны в пространстве). Учтем также, что для плоского движения при выбранном направлении осей координат

$$p_z = m\dot{z} = 0, \text{ так что } p_r^2 = p_\rho^2 + p_\phi^2.$$

В результате полную энергию частицы в этом случае можно представить в виде (рис. 13.2)

$$\epsilon = \frac{p_r^2 + p_\phi^2}{2m} + U(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + U(r),$$

$$p_\rho = m \cdot \dot{\rho}, \quad p_\phi = m \cdot \rho \cdot \dot{\phi}, \quad L = p_\phi \cdot \rho.$$

Подставляя в гамильтониан

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

значения операторов $\hat{p}_r = -i\hbar\nabla_r$ и \hat{L}^2 (10.11), придём к уравнению (13.20).

Отметим, что слагаемое $L^2/2mr^2$ называют *центробежным потенциалом*.

Из результатов, полученных в гл. 10 (см. (10.11), (10.18), (10.21)), можно записать

$$\Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) = -\ell(\ell+1) \cdot Y(\theta, \varphi) \quad (13.23)$$

Тогда уравнение для радиальной части волновой функции в (13.22) принимает вид

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \cdot R + \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot [\epsilon - U(r)] \cdot R = 0. \quad (13.24)$$

Энергия частицы с приведенной массой m_0 входит только в это уравнение, в "угловой части" решения (13.23) её нет. Но уравнение (13.24) не зависит от числа m , а это означает, что и энергия частицы от него не зависит. К этому обстоятельству мы вернёмся ниже.

Перейдём теперь к анализу движения электрона в кулоновском поле ядра, т.е. случаю потенциальной энергии (13.16). Для упрощения записи введём параметры

$$\kappa^2 = -\frac{2m_0\epsilon}{\hbar^2}, \quad \alpha_0 = \frac{m_0 Z e^2}{\hbar^2} = \frac{Z}{r_0}, \quad r_0 = \left(1 + \frac{m_e}{m_z} \right) \cdot R_{\text{Bohr}}, \quad (13.25)$$

которые имеют размерность обратного квадрата длины и длины соответственно. Здесь учтено, что энергия электрона в поле ядра отрицательна (см. (2.6)), так что $\kappa^2 > 0$. В рассматриваемом случае

$$m_0 = \frac{m_e m_z}{m_e + m_z} \approx m_e, \quad (13.26)$$

m_e, m_z – массы электрона и ядра. Тогда уравнение (13.24) можно записать в виде

$$R'' + \frac{2}{r} R' - \left[\kappa^2 - \frac{2\alpha_0}{r} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (13.27)$$

Здесь ' (апостроф) означает производную по r . Форму, в которой следует искать решение этого уравнения, можно "угадать", рассматривая поведение уравнения в области $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$. В первом случае из трёх слагаемых в квадратных скобках доминирующим будет последнее, так что уравнение приближённо можно будет записать в виде

$$R'' + \frac{2}{r} R' - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R = 0.$$

Ясно, что каждый из трёх членов уравнения имеет размерность R/r^2 , поэтому естественно искать его решение в виде

$$R = Cr^n.$$

Подстановка даёт

$$n(n-1) + 2n - \ell(\ell+1) = 0,$$

откуда, решая квадратное уравнение, найдём

$$n = \ell, -(\ell+1).$$

Таким образом, при $r \rightarrow 0$ решение содержит два слагаемых

$$R = C_1 r^\ell + C_2 r^{-(\ell+1)}.$$

Поскольку ψ -функция при $r \rightarrow 0$ ограничена, второе из них следует отбросить, положив $C_2 = 0$:

$$R(r) \rightarrow Cr^\ell \quad \text{при} \quad r \rightarrow 0. \quad (13.28)$$

В области больших r два вторых слагаемых в квадратных скобках (13.27) и член с R' малы, поэтому приближённо (асимптотически) можно принять

$$R'' - \kappa^2 R = 0.$$

Решение этого уравнения есть

$$R = A_1 e^{\kappa r} + A_2 e^{-\kappa r}.$$

Требование ограниченности R при $r \rightarrow \infty$ удовлетворяется, если $A_1 = 0$. Поэтому

$$R(r) \rightarrow Ae^{-\kappa r} \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty. \quad (13.29)$$

Выяснив асимптотические свойства решения уравнения (13.27), можно предположить, что полное решение следует искать в форме

$$R(r) = e^{-\kappa r} \cdot \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k. \quad (13.30)$$

Его подстановка в (13.27) даёт после сокращения на экспоненту

$$\begin{aligned} & \kappa^2 \sum_k a_k r^k - 2\kappa \sum_k a_k k r^{k-1} + \sum_k k(k-1) \cdot a_k r^{k-2} - 2\kappa \sum_k a_k r^{k-1} + 2 \sum_k k a_k r^{k-2} - \\ & - \left[\kappa^2 \sum_k a_k r^k - 2\alpha_0 \sum_k a_k r^{k-1} + \ell(\ell+1) \sum_k a_k r^{k-2} \right] = 0. \end{aligned}$$

Здесь, дабы упростить понимание, выписаны все слагаемые, возникающие при подстановке. После приведения подобных получим

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{ 2[\alpha_0 - \kappa(k+1)] \cdot a_k r^{k-1} + [k(k+1) - \ell(\ell+1)] \cdot a_k r^{k-2} \} = 0.$$

Приравняв нулю сумму коэффициентов при r в одной и той же степени, как это уже делалось выше, при выводе (7.82), получим рекуррентное соотношение для коэффициентов ряда (здесь мы выбрали r^{k-1} в качестве общего множителя для отбора коэффициентов):

$$2[\alpha_0 - \kappa(k+1)] \cdot a_k + [(k+1) \cdot (k+2) - \ell(\ell+1)] \cdot a_{k+1} = 0,$$

или

$$a_{k+1} = 2 \cdot \frac{\kappa(k+1) - \alpha_0}{(k+1) \cdot (k+2) - \ell(\ell+1)} \cdot a_k. \quad (13.31)$$

Дальнейшее рассуждение повторяет логику, использованную при анализе решения задачи о квантовом осцилляторе (§ 7.7): ряд (13.30) должен обрываться на некотором k , в противном случае он неограниченно возрастает. В данном случае из (13.31) получим при больших k :

$$a_{k+1} \approx \frac{2\kappa}{k+2} \cdot a_k, \quad k \gg \frac{\alpha}{\kappa}, \ell.$$

Тогда для всех последующих коэффициентов ряда в (13.30) можно написать рекуррентные формулы

$$\begin{aligned}
 a_{m+1} &= \frac{2\kappa}{m+1+1} \cdot a_m = \frac{2\kappa}{m+2} \cdot a_m, \\
 a_{m+2} &= \frac{2\kappa}{m+2+1} \cdot a_{m+1} = \frac{2\kappa}{m+3} \cdot \frac{2\kappa}{m+2} \cdot a_m, \\
 a_{m+3} &= \frac{2\kappa}{m+3+1} \cdot a_{m+2} = \frac{(2\kappa)^3}{(m+4)(m+3)(m+2)} \cdot a_m, \\
 &\dots \\
 a_{m+n} &= \frac{(2\kappa)^n \cdot (m+1)!}{(m+n+1)!} \cdot a_m.
 \end{aligned}$$

Теперь (сравни вывод (7.86)) ряд, входящий в решение (13.30), обрежем снизу, отбросив слагаемые с $k < m$ ($m \gg 1$). Это позволяет приближённо записать

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k \approx \sum_{k=m}^{\infty} a_k r^k = \sum_{n=0}^{\infty} a_{m+n} \cdot r^{m+n} \approx a_m r^m \cdot (m+1)! \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2\kappa r)^n}{(m+n+1)!}.$$

Нетрудно заметить, что сумма в последнем полученном выражении при больших n и $\kappa r > 1$ ведет себя как экспонента:

$$\sum_{n=m \gg 1}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = e^x.$$

Из всего этого громоздкого вывода для нас существенно, что в случае неограниченного ряда решение (13.30) пропорционально возрастающей экспоненте

$$R(r) = C e^{\kappa r},$$

что физически бессмысленно. Поэтому необходимо потребовать, чтобы при некотором $k = k_{\max}$ коэффициент a_{k+1} обращался в нуль. Тогда, как следует из (13.31), все следующие за ним коэффициенты также равны нулю, и ряд благополучно обрывается. Тогда решение $R(r)$ конечно. Таким образом, имеем

$$k_{\max} + 1 = \frac{\alpha_0}{\kappa}, \quad \text{или} \quad k \leq n-1, \quad \text{где} \quad n \equiv \frac{\alpha_0}{\kappa}. \quad (13.32)$$

Из формулы (13.32) следует, что $n = k_{\max} + 1$ должно быть целым числом. Подставив значение $\kappa = \alpha_0/n$ в (13.25), получим

$$\varepsilon = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot \frac{\alpha_0^2}{n^2} = -\frac{Z^2 e^2}{2r_0 n^2} = -\frac{Z^2 \varepsilon_0}{n^2} \cdot \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_z}}, \quad (13.33)$$

где ε_0 описывается выражением (2.8). Это есть значение энергии состояния (терма) атома с номером n , которое отличается от выражения (2.7) тем, что здесь присутствует поправка на конечность массы ядра. Это так называемый *изотопический сдвиг* энергии уровней атома

$$\frac{(\Delta\varepsilon)_{\text{isotope}}}{\varepsilon} \approx \frac{m_e}{m_z} = \frac{1}{1836 \cdot A}, \quad (13.34)$$

где A – атомный вес (см. также задачу 13.12 в § 13.4). Впрочем, в модели Бора также следует пользоваться m_0 (13.1), а не m_e , т.к. эта модель основана на классической задаче двух тел.

Из рекуррентного соотношения (13.31) следует ещё один важный результат: коэффициенты a_k ряда (13.30) конечны, если знаменатель в (13.31) не обращается в нуль, т.е. если

$$k+1 > l.$$

Поскольку k – целое, отсюда следует, что k должно начинаться со значения $k_{\min} = l$. Тогда вместе с (13.32) имеем

$$l \leq k \leq n-1. \quad (13.35)$$

Отсюда незамедлительно следует диапазон изменений числа l :

$$0 \leq l \leq n-1.$$

Таким образом, мы получили все возможные значения квантового числа l :

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (13.36)$$

Физический смысл ограничения сверху числа l достаточно ясен: кинетическая энергия электрона не может превосходить разность его полной и потенциальной энергий (см. задачу 13.8 ниже).

Согласие результата решения уравнения Шрёдингера и модели атома Бора (2.7) явилось в своё время ярким доказательством плодотворности новой квантовой механики.

§ 13.3. Собственные функции и уровни энергии электрона

в атоме водорода

Число n в выражениях (2.7) и (13.33) называют главным квантовым числом, числа ℓ и m , соответственно, азимутальным и магнитным квантовыми числами (смысл названия "магнитное" число поясняется в § 18.1). Главное квантовое число определяет энергию уровня, абсолютное значение которой убывает как n^{-2} с ростом n . При заданном n число ℓ принимает все возможные целочисленные значения от 0 до $n-1$ (13.36), а число m – от $-\ell$ до ℓ (см. (10.15)). Таким образом, при заданном n возможны

$$N_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2 \quad (13.37)$$

различных состояний электронов в атоме. Говорят, что данное состояние является *вырожденным*, причём кратность вырождения равна n^2 : каждое из $n-1$ состояний, различающихся числом ℓ , отличаются одно от другого значениями числа m , и таких "подсостояний" $2\ell+1$. Подчеркнём ещё раз, что все n^2 имеют одинаковую энергию (13.33). В следующей главе мы увидим, что учёт более "тонких" эффектов снимает это вырождение.

В атомной спектроскопии исторически приняты обозначения состояний, различающихся азимутальным квантовым числом:

ℓ	0	1	2	3	4	5	6	7	
символ	S	P	D	F	G	H	I	K	(13.38)
состояния									

Дальше мы увидим, что эти состояния различают ещё по значению полного момента электрона. Без учёта этого различия уровни принято обозначать символами типа

$$1S, 3D, 5F$$

и т.д., где цифра обозначает величину n , а буква – значение ℓ (рис. 13.3).

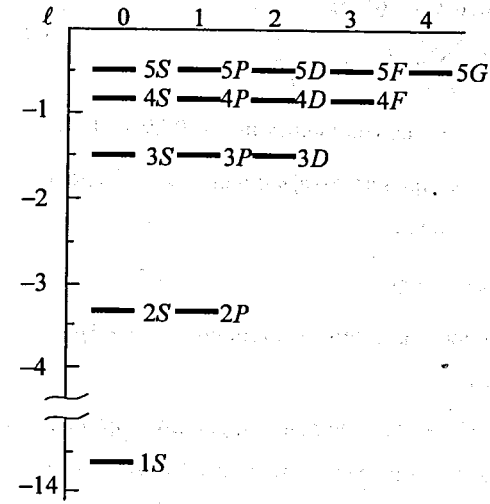


Рис. 13.3. Схема первых пяти уровней атома водорода (основная структура)

Вырожденные состояния различаются характером "поведения" электрона в каждом из них – видом волновой функции. Для выяснения этого обстоятельства вернёмся к решению (13.21) и начнём с его радиальной части $R(r)$ (13.30). Поскольку теперь мы знаем, что индекс суммирования k ограничен снизу и сверху согласно (13.35), нужно в сумме в (13.30) оставить только "разрешённые" слагаемые, положив в остальных $a_k = 0$. Получим

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k \Rightarrow \sum_{k=\ell}^{n-1} a_k r^k = r^\ell \cdot \sum_{k=0}^{n-\ell-1} a_k r^k, \quad (13.39)$$

переход от второй суммы к третьей произведён заменой индексов

$$k \Rightarrow k + \ell.$$

Тогда для коэффициентов ряда из (13.31) с учётом (13.32), (13.25) и (13.33) имеем

$$a_{k+1} = \frac{2Z}{nr_0} \cdot \frac{k - (n - \ell - 1)}{(k+1) \cdot [k + 2(\ell + 1)]} \cdot a_k, \quad 0 \leq k \leq n - \ell - 1. \quad (13.40)$$

Теперь можно записать полное решение (13.21), опустив для краткости временную экспоненту:

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$

$$R_{n\ell}(r) = e^{-\kappa_n r} \cdot r^\ell \cdot \sum_{k=0}^{n-\ell-1} a_k r^k, \quad \kappa_n = \frac{Z}{nr_0}, \quad (13.41)$$

где функции $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ описываются соотношениями (10.29)–(10.31), а коэффициенты a_k находятся из (13.40), причём коэффициент a_0 определяется условием нормировки (задачи 13.3, 13.4 ниже).

Отметим, что из условия безразмерности величины $|\psi|^2 dV$ следует размерность коэффициентов a_k : это обратная длина в степени $(k + \ell + 3)/2$ (см. также выражения (13.44)–(13.48) ниже).

И ещё одно важное замечание. Поскольку шаровые функции нормированы на единицу, то радиальная часть волновой функции также нормирована на единицу:

$$\int_0^\infty R_{n\ell}(r) \cdot r^2 \cdot dr = 1. \quad (13.42)$$

Задача 13.3. Вычислить волновую функцию электрона в атоме водорода в состоянии $1S$.

В состоянии $1S$ имеем

$$n = 1, \quad \ell = m = 0.$$

Поэтому из (10.31) и (13.41) находим, что $\psi_{1s0}(r, \theta, \varphi)$ сферически-симметрична:

$$\psi_{1s0}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot a_0 \cdot e^{-r/r_0}.$$

Здесь и далее индекс $m = 0$ у функции S -состояния для единства обозначений сохранен, хотя он и не несет существенной информации: состояния с другими значениями m для S -состояния невозможны. Нормируя волновую функцию на единицу, находим

$$1 = \frac{1}{4\pi} a_0^2 \int_0^\infty e^{-2r/r_0} r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{a_0^2}{4} r_0^3,$$

откуда

$$\psi_{1s0}(r) = \frac{e^{-r/r_0}}{\sqrt{\pi} \cdot r_0^{3/2}}. \quad (13.43)$$

Приведем для справок значение интеграла

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, \quad n - \text{целое}, \quad a > 0. \quad (13.44)$$

Задача 13.4. То же для уровней с $n = 2$.

Уровень 2 вырожден четырёхкратно:

$$n = 2 \quad \begin{matrix} 2S & \ell = 0, & m = 0; \\ 2P & \ell = 1, & m = -1, 0, 1. \end{matrix}$$

Соответственно, имеем четыре состояния, энергий электрона в которых одна и та же.

В состоянии $2S$ имеем (см. (13.41) и (10.31))

$$\psi_{2s0} = e^{-r/2r_0} (a_0 + a_1 r) \cdot Y_{00}(\theta, \varphi),$$

а из (13.40) найдём

$$a_1 = -\frac{a_0}{2r_0}.$$

Отсюда

$$\psi_{2s0}(r) = \frac{e^{-r/2r_0}}{2\sqrt{4\pi}} \left(2 - \frac{r}{r_0} \right) \cdot a_0. \quad (13.45)$$

Нормируя ψ_{2s0} на единицу, как это делалось в предыдущей задаче, найдём

$$a_0 = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot r_0^{3/2}}$$

и

$$\psi_{2s0}(r) = \frac{e^{-r/2r_0}}{4\sqrt{2\pi} r_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{r_0} \right). \quad (13.46)$$

В состоянии $2P$ проще вычислить отдельно $R_{2p}(r)$ и использовать известные функции $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$. Из соотношения (13.41) запишем

$$R_{2p} = e^{-r/2r_0} \cdot r \cdot a_0.$$

Из условия нормировки (13.42) найдём

$$1 = \int_0^\infty R_{2p}^2 \cdot r^2 \cdot dr = a_0^2 \int_0^\infty e^{-r/r_0} \cdot r^4 \cdot dr = 24 \cdot a_0^2 \cdot r_0^5. \quad (13.47)$$

Используя (10.31), получим

$$\psi_{2p0}(r, \theta) = \frac{e^{-r/2r_0}}{\sqrt{24} \cdot r_0^{3/2}} \cdot r \cdot Y_{10}(\theta) = \frac{e^{-r/2r_0}}{4\sqrt{2\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \cos \theta. \quad (13.48)$$

При $m = \pm 1$ волновая функция в P -состоянии имеет ту же радиальную часть, что и при $m = 0$, но другую угловую часть — $\psi_{1\pm 1}(\theta, \varphi)$ (см. (10.31)). Соответственно, найдём

$$\psi_{2P\pm 1} = \frac{e^{-r/2r_0}}{\sqrt{24} \cdot r_0^{3/2}} \cdot r \cdot Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \frac{e^{-r/2r_0}}{8\sqrt{\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}. \quad (13.49)$$

Читателю доставит несомненное удовольствие вычислить самостоятельно ψ -функции электрона в состоянии $n = 3$:

$$\begin{aligned} 3S \quad \ell = 0, \quad m = 0; \\ n = 3 \quad 3P \quad \ell = 1, \quad m = -1, 0, 1; \\ 3D \quad \ell = 2, \quad m = -2, -1, 0, 1, 2. \end{aligned}$$

Этот уровень вырожден девятикратно. Соответственно,

$$\begin{aligned} \psi_{3S0}(r) &= \frac{e^{-r/3r_0}}{81\sqrt{3\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \left[21 - 18 \cdot \frac{r}{r_0} + 2 \cdot \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \right], \\ \psi_{3P0}(r, \theta) &= \frac{\sqrt{2} \cdot e^{-r/3r_0}}{81\sqrt{\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \left(6 - \frac{r}{r_0} \right) \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \cos \theta, \\ \psi_{3P\pm 1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{e^{-r/3r_0}}{81\sqrt{\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \left(6 - \frac{r}{r_0} \right) \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ \psi_{3D0}(r, \theta) &= \frac{e^{-r/3r_0}}{81\sqrt{6\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \cdot (3 \cos^2 \theta - 1), \\ \psi_{3D\pm 1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{\sqrt{2} \cdot e^{-r/3r_0}}{81\sqrt{\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ \psi_{3D\pm 2}(r, \theta, \varphi) &= \frac{e^{-r/3r_0}}{81\sqrt{2\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \cdot \sin^2 \theta \cdot e^{\pm i2\varphi}. \end{aligned} \quad (13.50)$$

Задача 13.5. Вычислить среднеквадратичный и средний размеры атома водорода в основном состоянии.

$$\begin{aligned} \langle r_{1S}^2 \rangle &= \int_V r^2 \cdot |\psi_{1S}|^2 \cdot dV = 4\pi \cdot \frac{1}{\pi r_0^3} \int_0^\infty r^2 \cdot e^{-2r/r_0} \cdot r^2 dr = 3r_0^2, \\ \sqrt{\langle r_{1S}^2 \rangle} &= \sqrt{3}r_0, \\ \langle r_{1S} \rangle &= \frac{4\pi}{\pi r_0^3} \int_0^\infty r e^{-2r/r_0} \cdot r^2 dr = \frac{3}{2} \cdot r_0. \end{aligned} \quad (13.51)$$

Задача 13.6. Вычислить средний размер атома водорода в $2S$ - и $2P$ -состояниях.

Используя (13.46), (13.48), аналогично предыдущей задаче найдём значения $\langle r_{2S} \rangle$ и $\langle r_{2P} \rangle$.

Здесь, как и при вычислении ψ_{2P} , удобно использовать свойство нормированности на единицу угловой части волновых функций. Поэтому имеем

$$\begin{aligned} \langle r_{2S} \rangle &= \int_0^\infty r \cdot (R_{2S})^2 \cdot r^2 \cdot dr = \frac{1}{8r_0^3} \int_0^\infty r^3 \left(2 - \frac{r}{r_0} \right)^2 \cdot e^{-r/r_0} \cdot dr = 6r_0, \\ \langle r_{2P} \rangle &= \int_0^\infty r \cdot (R_{2P})^2 \cdot r^2 \cdot dr = \frac{1}{24r_0^3} \int_0^\infty r^5 \cdot e^{-r/r_0} \cdot dr = 5r_0. \end{aligned} \quad (13.52)$$

Как следует из результатов задач 13.5, 13.6, средний размер атома водорода $\langle r_{n\ell} \rangle$ растёт с номером n . Вычисление его значения в общем случае требует привлечения теории специальных функций: функция $R_{n\ell}(r)$ в (13.41) есть частный случай так называемой вырожденной гипергеометрической функции (см. [2], § 36). Такое вычисление (см. там же и приложение f) даёт

$$\langle r_{n\ell} \rangle = \frac{r_0}{2} \cdot [3n^2 - \ell \cdot (\ell + 1)]. \quad (13.53)$$

Поскольку $\ell \leq n - 1$, то при больших n (сильно возбуждённый атом) приближённо получим

$$\langle r_{n\ell} \rangle \approx n^2 \cdot r_0. \quad (13.54)$$

На рис. 13.4 показаны распределения по радиусу так называемой *радиальной плотности вероятности*, т.е. вероятности обнаружить электрон на расстоянии r от ядра в сферическом слое толщиной dr :

$$\rho_{n\ell}(r) \cdot dr \equiv dP_{n\ell}(r) = R_{n\ell}^2(r) \cdot r^2 dr \cdot \int_\Omega |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 \cdot d\Omega = R_{n\ell}^2(r) \cdot r^2 dr. \quad (13.55)$$

(Отметим ещё раз, что интеграл по θ, φ в этом выражении равен единице вследствие нормированности шаровых функций). Функция $\rho_{n\ell}(r)$ обращается в нуль в конечном числе точек, количество которых немедленно найдём из условия

$$R_{n\ell}(r) = 0.$$

Поскольку сумма в $R_{n\ell}(r)$ (13.41) является полиномом степени $N = n - \ell - 1$, то это уравнение имеет N корней, а функция $dP_{n\ell}(r)$ имеет, соответственно, N узлов, что и прослеживается на кривых рис. 13.4. При этом узел $dP_{n\ell}(0)$ в начале координат в это число не входит (тем более, что сумма в $R_{n\ell}$ при $r=0$ равна $a_0 = \text{const}$).

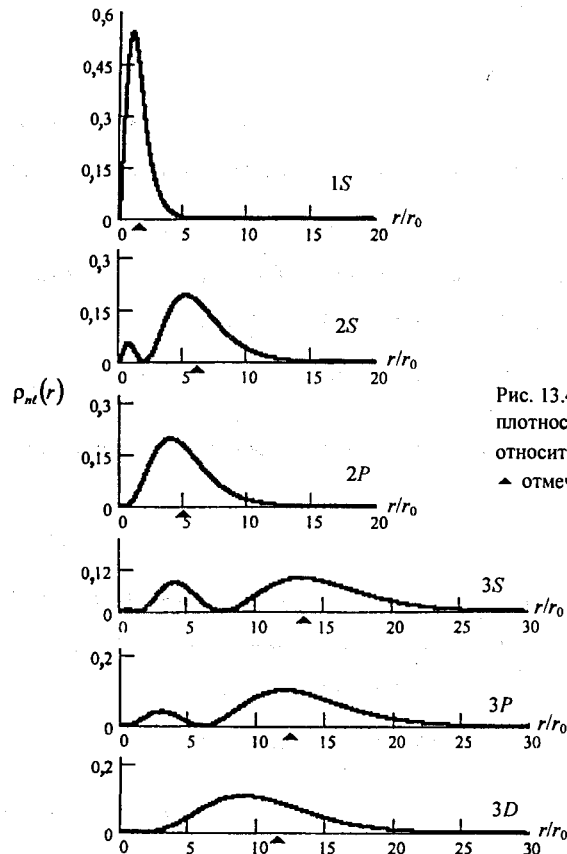


Рис. 13.4. Распределение радиальной плотности вероятности $\rho_{n\ell}(r)$ (в относительных единицах). Треугольниками \blacktriangle отмечены значения $\langle r_{n\ell} \rangle / r_0$

Задача 13.7. Найти радиальную плотность вероятности для атома водорода в состоянии с максимально возможным значением момента. Показать, что положение максимума функции $\rho_{n\ell}(r)$ в этом случае совпадает с радиусом боровской орбиты.

При $\ell = n - 1$ функция $R_{n\ell}(r)$ в (13.41) принимает вид

$$R_{n\ell}(r)|_{\ell=n-1} = e^{-\kappa r} \cdot r^{n-1} \cdot a_0, \quad \kappa_n = \frac{1}{nr_0}.$$

Нормируя эту функцию на единицу, согласно (13.42) и (13.44) найдём

$$a_0^{-2} = \int_0^{\infty} e^{-2r/r_0} \cdot r^{2(n-1)} \cdot r^2 dr = \frac{(2n)!}{2^{2n+1}} \cdot n^{2n+1} \cdot r_0^{2n+1}.$$

Подставив значение a_0 в выражение для $R_{n\ell}|_{\ell=n-1}$, из (13.55) найдем

$$\rho_{n\ell}(r)|_{\ell=n-1} = \left(\frac{2}{n}\right)^{2n+1} \cdot \frac{r^{2n}}{(2n)! \cdot r_0^{2n+1}} \cdot e^{-2r/r_0}. \quad (13.56)$$

Максимум этой функции находится на сферической поверхности радиуса

$$r_{\max} = n^2 r_0, \quad (13.57)$$

что совпадает с (2.4) при $m_e \ll m_z$ ($r_0 \approx R_{\text{Бор}}$).

Результат задачи 13.7 имеет глубокий физический смысл: в модели Бора нет различия между числами n и ℓ (точнее, число ℓ там обозначено буквой n , см. (2.3)), поэтому радиусы боровских орбит и соответствуют наиболее вероятным значениям r при $\ell = \ell_{\max} = n - 1$.

Обратим внимание на тот факт, что площади под кривыми рис. 13.4 одинаковы и равны единице. Это следует из определения $\rho_{n\ell}(r)$ и нормировки $R_{n\ell}(r)$ (13.42):

$$\int_0^{\infty} \rho_{n\ell}(r) \cdot dr = \int_0^{\infty} R_{n\ell}^2(r) \cdot r^2 dr = 1.$$

Распределение плотности вероятности нахождения электрона по углам θ, φ найдём, проинтегрировав радиальную часть квадрата модуля ψ -функции (см. (13.42)):

$$\frac{dP_{\ell m}(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \rho_{\ell m}(\theta, \varphi) = \int_0^{\infty} R_{n\ell}^2(r) \cdot r^2 dr \cdot |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 = |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2. \quad (13.58)$$

Это есть "угловая плотность вероятности", а $dP_{\ell m}(\theta, \varphi)$ – вероятность обнаружить электрон внутри элемента телесного угла $d\Omega$ на направлении, заданном углами θ, φ . Часто для графического изображения подобных угловых зависимостей

используют так называемые *полярные диаграммы* (рис. 13.5), в которых точки на кривых отстоят от начала координат на расстояние, пропорциональное значению изображаемой величины на данном направлении. В данном случае такой величиной является функция $\rho_{\ell m}(\theta, \varphi)$. Зависимость угловой плотности вероятности от θ и φ следует из выражений (10.30), (10.31) для шаровых функций.

В частности, видно, что азимутальный угол исчезает при вычислении $|Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2$,

т.к. $|e^{im\varphi}|^2 = 1$. Таким образом, функция $\rho_{\ell m}(\theta, \varphi) = \rho_{\ell m}(\theta)$ является функцией только полярного угла θ , т.е. угловая плотность вероятности аксиально-симметрична относительно оси z .

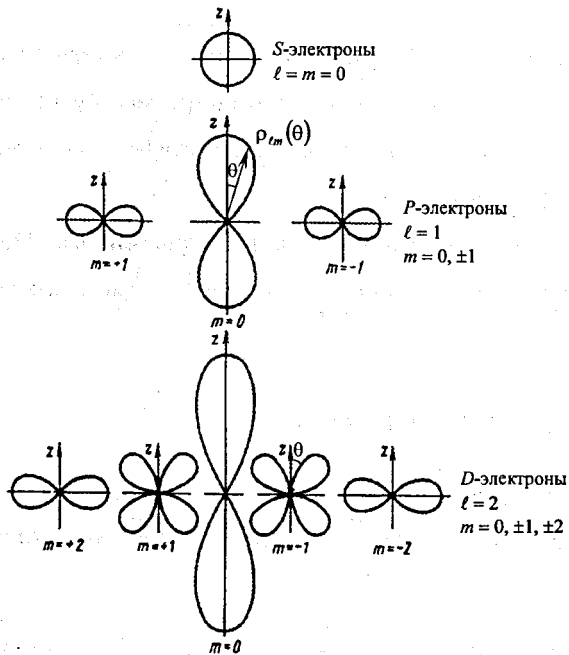


Рис. 13.5. Полярные диаграммы функции $\rho_{\ell m}(\theta)$ для S -, P - и D -состояний атома водорода

Комбинируя рис. 13.4 и 13.5, можно представить себе картину "облака вероятности" для низших состояний, $1S$ - $3D$, атома. Плотность этого облака (см. (13.55) и (13.58)) есть

$$\rho_{n\ell m}(r, \theta) = |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 \cdot r^2 = \rho_{n\ell}(r) \cdot \rho_{n\ell}(\theta) = \rho_{n\ell}(r) \cdot |Y_{\ell m}(\theta)|^2. \quad (13.59)$$

Следует подчеркнуть, что это плотность вероятности обнаружения электрона на расстоянии r от ядра в интервале $dr \cdot d\Omega$. В $1S$ -состоянии, подставив в (13.59) значение ψ_{1S0} (13.43), найдем

$$\rho_{100}(r, \theta) \equiv \rho_{100}(r) = \frac{r^2 e^{-2r/r_0}}{\pi r_0^3}. \quad (13.60)$$

Обратим внимание, что из (13.56) следует значение $\rho_{10}(r) = 4\pi\rho_{100}(r, \theta)$, — этот результат получим, проинтегрировав (13.60) по телесному углу, т.е. вычислив плотность вероятности обнаружения электрона в сферическом слое (r, dr) . Плотность "облака вероятности" (13.60) сферически-симметрична, нарастает от нуля в центре "шара" до максимума при (см. (13.57))

$$(r_{\max})_{1S} = r_0,$$

а затем спадает на размере $\Delta r \sim 5r_0$ примерно в десять раз (см. рис. 13.4).

В состоянии $2S$ сферическая симметрия сохраняется, но появляется два максимума. Воспользовавшись значением $\psi_{2S0}(r)$ (13.46), найдем

$$\rho_{200}(r) = \frac{r^2 e^{-r/r_0}}{32\pi r_0^3} \cdot \left(2 - \frac{r}{r_0}\right)^2. \quad (13.61)$$

Вычислив максимум этой функции, получим

$$(r_{\max})_{2S} = (3 \pm \sqrt{5})r_0,$$

причем второй максимум примерно втрое больше первого (рис. 13.4).

В состоянии $2P$ сферическая симметрия "облака" исчезает и появляются направления повышенной плотности (рис. 13.5). В состояниях $2P$ с $m = \pm 1$ эти направления лежат в плоскости, ортогональной оси z , а при $m = 0$ — на оси z . Первый максимум в зависимости от r исчезает. Таким образом, "шар" превращается в "тор" — тело вращения с осью, направленной вдоль оси z .

Анализ состояний с $n = 3$ аналогичен, "облако" остаётся телом вращения, но более сложной формы.

Задача 13.8. Получить собственные функции и значения энергии трех нижних уровней позитрония – электромагнитно-связанных электрона и позитрона.

В атоме позитрония (Ps) обе частицы имеют одинаковые массы, равные массе электрона, и противоположные по знаку заряды $+e$ и $-e$. Поэтому Ps отличается от атома водорода значением приведенной массы

$$(m_0)_{Ps} = \frac{m_e}{2}.$$

Собственные функции Ps будут иметь тот же вид, что и у водорода, с заменой

$$m_0 \rightarrow \frac{m_e}{2}, r_0 \rightarrow 2R_{Bohr},$$

что и нужно проделать в формулах (13.43), (13.46), (13.49) и (13.50) для трех нижних состояний. Для энергии этих состояний из (13.33) найдем

$$(\epsilon_1)_{Ps} = -6,8 \text{ эВ}, (\epsilon_2)_{Ps} = -1,7 \text{ эВ}, (\epsilon_3)_{Ps} = -0,755 \text{ эВ}.$$

Отметим, что размер атома позитрония вдвое больше размера атома водорода.

Задача 13.9. Воспользовавшись значением энергии атома (13.33), момента электрона (10.18) и среднего радиуса "орбиты" электрона (13.54), получить ограничение значения числа ℓ (13.36) из классического рассмотрения энергии электрона в атоме.

В атоме Бора (§ 2.2) энергия электрона на орбите радиусом r_n равна (см. (2.6) и (2.4), $Z = 1$):

$$\epsilon_n = -\frac{e^2}{2r_n} = \frac{mv_n^2}{2} - \frac{e^2}{r_n}, \quad r_n = n^2 r_0,$$

v_n – полная скорость электрона на орбите. Поскольку орбитальный момент электрона равен

$$L = mv_n r_n,$$

где v_r – компонента скорости электрона, касательная к орбите, имеем

$$\frac{mv_n^2}{2} \geq \frac{L^2}{2mr_n^2}.$$

Подставив сюда значения L^2 из (10.18) и кинетической энергии из первого равенства, найдем

$$\frac{e^2}{2r_n} \geq \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_n r_n^2},$$

или, с учетом (2.4) и (2.5),

$$n^2 \geq \ell(\ell+1).$$

Поскольку ℓ – целое, то $\ell \leq n-1$.

§ 13.4. Водородоподобные атомы и ионы

К ним относятся атомы щелочных металлов (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr, $^{111}\text{A}^*$), у которых единственный валентный электрон довольно слабо связан с остальной частью атома, состоящей из ядра и плотно упакованной внутренней части электронной оболочки, содержащей $Z-1$ электронов (Z – атомный номер, или заряд ядра). Аналогичную структуру имеют ионы, находящиеся в таком зарядовом состоянии (т.е. ионизированные до такой степени), что на внешней оболочке остаётся только один электрон, а все внутренние оболочки заполнены. Например, He^+ , Li^{++} , Be^+ , Mg^+ , Si^{3+} и т.д. (см. § 15.3). Этот единственный внешний электрон определяет, в основном, химические (валентные) свойства атома и иона и их оптические свойства. Термы таких атомов и ионов по-прежнему описываются формулами (13.33), в которые вместо Z следует подставить Z_{eff} , определяющее заряд остатка атома или иона, в поле которого находится наш "единственный" электрон. Так, для указанных выше ионов имеем

Ион	He^+	Li^{++}	Be^+	Mg^+	Si^{3+}
Z_{eff}	2	2	2	2	4

Таким образом, $Z_{\text{eff}} = i + 1$, где i – число электронов, удалённых из атома. Для всех щелочных металлов $Z_{\text{eff}} = 1$. Конечно, картина термов не столь проста и не сводится к полному подобию термов атома водорода. Чем тяжелее атом, тем сильнее сказывается влияние "остатка" электронной оболочки и её конкретной структуры.

Такое влияние просто понять, воспользовавшись снова рис. 13.4, 13.5. При заданном n плотность "облака вероятности" существенно зависит от значения ℓ : чем больше ℓ , тем дальше от центра "живёт" электрон, что хорошо видно на графиках $\rho_{nl}(r)$ для $n = 3$ термов (рис. 13.4). При этом, правда, $\langle r_{nl} \rangle$ уменьшается (что следует из формулы (13.53)), но зато падает вероятность пребывания

* Короткоживущий элемент, синтезированный в ОИЯИ и GSI (Германия).

электрона в области малых r , т.е. внутри остатка оболочки, где электрическое поле существенно отличается от поля точечного заряда $Z_{\text{eff}} \cdot e$. Поэтому энергия термов с большими значениями ℓ имеет те же значения, что и для атома водорода, а с малыми — отличное от них. Соответственно, в водородоподобных атомах (ионах) снимается вырождение уровней. И, естественно, чем больше n , тем "более водородоподобным" становится атом — возбуждённый электрон всё больше удаляется от внутренней части атома.

Задача 13.10. Оценить разность энергий состояний с $\ell = n - 1$ и $\ell = 0$ в водородоподобном ионе.

Указание: воспользоваться формулой (13.53) (в пренебрежении тонкой и сверхтонкой структурой, см. гл. 14).

В атоме водорода энергия состояния не зависит от ℓ (см. (13.33)). В водородоподобном ионе можно грубо оценить влияние внутренней части электронной оболочки, приняв, что разность энергий термов с разными ℓ отличается на величину $\Delta \varepsilon$

$$\frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_{n\ell} - \varepsilon_{n\ell'}}{\varepsilon_{n\ell} + \varepsilon_{n\ell'}} \sim 2 \frac{\langle r_{n\ell} \rangle - \langle r_{n\ell'} \rangle}{\langle r_{n\ell} \rangle + \langle r_{n\ell'} \rangle} \leq 2 \frac{\langle r_{n,0} \rangle - \langle r_{n,n-1} \rangle}{\langle r_{n,0} \rangle + \langle r_{n,n-1} \rangle} = \frac{(n-1)}{5n-1}. \quad (13.62)$$

Тогда, например, для Na, у которого (см. § 15.4 и табл. 15.4) основным является состояние с валентным электроном на уровне $n = 3$, найдём

$$\frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_3} \sim \frac{2}{7}.$$

У натрия $\varepsilon_{3s} \approx -5$ эВ, $\varepsilon_{3p} \approx -3$ эВ, т.е. $\Delta \varepsilon / \varepsilon \approx 2/5$, что находится в разумном согласии с полученной оценкой.

Задача 13.11. Оценить изменение времени жизни α -радиоактивного ядра (§ 7.8) при ненулевом орбитальном моменте α -частицы в ядре.

При $\ell \neq 0$ $\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi)$, и уравнение (7.54) можно привести к виду, аналогичному (13.24). Теперь в уравнении для радиальной части функции $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ появляется центробежный потенциал (см. задачу 13.2)

$$U_{\ell}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_0 r^2},$$

и уравнение приобретает вид

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial R}{\partial r} \right) + k^2(r) \cdot R(r) = 0,$$

$$k^2(r) = \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot (\varepsilon - U(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}.$$

"Центробежная добавка" не позволяет просто свести уравнение для $R(r)$ к одномерному случаю, как это сделано в § 7.4. Поэтому, не претендуя на точность решения, ограничимся оценками по порядку величины. Нетрудно видеть, что центробежный потенциал поднимает уровень потенциального барьера (рис. 7.8), и при этом значение U_{max} (7.52) возрастает до

$$U'_{\text{max}} \sim \frac{2(Z-2) \cdot e^2}{r_0^2} + U_{\ell}(r_0).$$

При $\ell = 1$ имеем

$$U_{\ell}(r_0) = \frac{\hbar^2 c^2}{m_0 c^2 r_0^2} = \frac{(6,58 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{с} \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с})^2}{4 \cdot 938 \cdot 10^6 \text{ эВ} \cdot (0,9 \cdot 10^{-12} \text{ см})^2} \approx 0,13 \text{ МэВ}.$$

Воспользовавшись результатами § 7.4, находим, что время жизни радиоактивного ядра возрастает на величину (см. (7.58))

$$\frac{\Delta \tau}{\tau_{\alpha}} \sim \frac{\sqrt{8m_0 c^2 \cdot \varepsilon}}{\hbar} \cdot \frac{r_0}{c} \cdot \frac{dF}{d\varepsilon} \cdot \Delta \varepsilon,$$

$$\frac{dF}{d\varepsilon} = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon-1}}, \quad \Delta \varepsilon \sim \frac{U_{\ell}(r_0)}{\varepsilon}.$$

Для ${}_{238}^{92}\text{U}$ это даёт

$$\frac{\Delta \tau}{\tau_{\alpha}} \sim 0,6.$$

Такое значительное возрастание времени жизни при небольшом увеличении U_{max} является результатом экспоненциальной зависимости τ_{α} от U_{max} , отмеченной в § 7.4.

Задача 13.12. Одним из методов изучения фундаментальных законов природы в физике элементарных частиц является спектрометрия "антипротонных атомов", в которых один из электронов электронной оболочки замещён антипротоном. В этом случае радиус борховской орбиты этого "электрона" настолько мал, что становится существенным ядерное взаимодействие (см. задачу 5.4). Такие "экзотические атомы" используются для исследования природы фундаментальных взаимодействий.

Найти значение размера протония — электромагнитно-связанных протона (p) и антипротона (\bar{p}).

Воспользовавшись результатами задачи 13.5, заменив в (2.5), (13.25) m_e на массу антипротона m_p , учтём значение приведённой массы (13.1) для протония

$$m_0 = \frac{m_p}{2}.$$

Найдём

$$\langle r_{1s} \rangle_{\overline{p}} = 3 \frac{\hbar^2}{m_p e^2} = 3 \frac{m_e}{m_p} \cdot R_{\text{Bohr}} \approx 8,64 \cdot 10^{-12} \text{ см.}$$

ГЛАВА 14. ТОНКАЯ И СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА АТОМНЫХ УРОВНЕЙ

§ 14.1. Теория возмущений. Возмущения, не зависящие от времени

Очень часто при анализе квантово-механических систем требуется описать их поведение в присутствии слабого возмущения, которое вносит небольшое искажение в исходное состояние, изменяя на малую величину значения параметров, описывающих состояние. Главным из таких параметров, как уже понятно, является энергия состояния. Подобные задачи удаётся решать методом последовательных приближений. В этом параграфе мы рассмотрим случай, когда возмущение не зависит от времени.

Пусть в отсутствие возмущения система (например, атом) находится в стационарном состоянии, которое описывается функцией $\psi^0(\vec{r})$, являющейся решением *стационарного уравнения Шрёдингера* (7.13), а решение временного уравнения имеет вид (7.12)

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-iEt/\hbar}. \quad (14.1)$$

Уравнение для функции $\psi(r)$, описывающей стационарное состояние, удобно записать здесь в виде

$$\hat{H}^0 \psi^0(\vec{r}) = \varepsilon^0 \psi^0(\vec{r}), \quad (14.2)$$

где

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}).$$

Возмущение, действие которого требуется описать, обозначим через $\hat{V}(\vec{r})$, учитывая, что это может быть некоторое выражение, содержащее операторы, так что гамильтониан системы в присутствии возмущения принимает вид

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}. \quad (14.3)$$

Соответственно, возмущённое состояние системы описывается функцией $\psi(\vec{r})$, являющейся решением "возмущённого" уравнения

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}). \quad (14.4)$$

Будем искать решение $\psi(\vec{r})$ в виде разложения в ряд по собственным функциям невозмущённых состояний системы:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{m=1}^N a_m \psi_m^0(\vec{r}), \quad (14.5)$$

N – число возможных состояний. Подставив это решение в (14.4) и учитывая, что функции ψ_m^0 удовлетворяют "невозмущённому" уравнению (14.2) с собственными значениями ε_m^0 , получим

$$\sum_m a_m (\varepsilon_m^0 + \hat{V}) \cdot \psi_m^0 = \varepsilon \sum_m a_m \psi_m^0.$$

Умножив обе части равенства на $(\psi_n^0)^*$ и проинтегрировав по всему объёму системы, найдём, учтя свойство ортонормированности функций ψ_m^0 (8.18):

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_n^0) \cdot a_n &= \sum_{m=1}^N V_{nm} \cdot a_m, \\ V_{nm} &= \int_V (\psi_n^0)^* \hat{V}(\psi_m^0) \cdot d^3r. \end{aligned} \quad (14.6)$$

Нетрудно видеть, что набор величин V_{nm} образует некоторую матрицу, а сами эти числа называются *матричными элементами оператора \hat{V}* .

В современной записи матричных элементов (14.6) используются так называемые векторы состояний квантовой системы:

$$|x\rangle = |\ell, m, s, \dots\rangle,$$

где i – номер частицы, ℓ, m, s – квантовые числа, характеризующие её состояние. По существу, векторы состояний – те же волновые функции системы. Однако, используя векторно-матричный формализм, можно не только упростить запись, но и развить аппарат квантовой механики. В этих обозначениях матричный элемент V_{nm} (14.6) принято записывать в виде

$$V_{nm} = \langle x_n | \hat{V} | x_m \rangle. \quad (14.7)$$

Само по себе уравнение (14.6) ещё мало что нам даёт, т.к. в нём присутствуют неизвестные коэффициенты a_m . Попытаемся продвинуться дальше, используя метод последовательных приближений, т.е. представив искомую энергию \mathcal{E} и коэффициенты a_m в виде суммы убывающих членов ряда:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \mathcal{E}^{(0)} + \mathcal{E}^{(1)} + \mathcal{E}^{(2)} + \dots, \\ a_m &= a_m^{(0)} + a_m^{(1)} + a_m^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (14.8)$$

Поскольку индекс (0) соответствует отсутствию возмущения ($V = 0$), то из (14.6) следует, что в этом нулевом приближении энергия системы просто равна энергии невозмущенного n -го состояния:

$$\mathcal{E}_n^{(0)} = \varepsilon_n^0.$$

Коэффициент $a_n^{(0)}$, очевидно, равен единице. В этом легко убедиться, воспользовавшись равенством (14.5): при $V = 0$ функция $\psi(\vec{r})$ должна совпадать с одной из функций ψ_m^0 невозмущенной системы, а именно, с функцией ψ_n^0 . Поэтому также все a_m^0 при $m \neq n$ равны нулю.

Для нахождения первого приближения подставим в (14.6)

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \varepsilon_n^0 + \mathcal{E}_n^{(1)}, & a_m^{(0)} &= \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n. \end{cases} \end{aligned} \quad (14.9)$$

Найдем с точностью до членов первого порядка малости

$$\mathcal{E}_n^{(1)} \cdot (1 + a_n^{(1)}) \approx \mathcal{E}_n^{(1)} \approx \sum_{m=1}^N V_{nm} a_m^{(0)} = \sum_{m=1}^N V_{nm} \cdot \delta_{mn} = V_{nn}. \quad (14.10)$$

Таким образом, энергия n -го состояния изменяется под действием возмущения на величину

$$\delta \mathcal{E}_n^{(1)} \equiv \mathcal{E}_n^{(1)} = V_{nn} = \int (\psi_n^0)^\dagger \hat{V} (\psi_n^0) \cdot d^3 r \equiv \langle x_n | \hat{V} | x_n \rangle. \quad (14.11)$$

Естественно, что полученный результат справедлив при условии малости этой поправки:

$$\delta \mathcal{E}_n^{(1)} \ll \varepsilon_n^0. \quad (14.12)$$

Всё сказанное выше справедливо, если функции $\psi_m^0(\vec{r})$ определены однозначно. Это условие нарушается в случае *вырожденного состояния*. Действительно, как мы видели в § 13.3, в атоме водорода возможны состояния, энергия которых в первом приближении одинакова, а волновые функции существенно различаются: в состоянии с заданным n таких "подсостояний" n^2 . В таком случае просто неясно, какую из ψ -функций n -го состояния следует подставлять в (14.11), чтобы вычислить сдвиг энергии в присутствии возмущения. Ответ на этот вопрос удаётся найти следующим образом.

Пусть невозмущенное состояние системы номер n вырождено, так что функции $\psi_{n1}^0, \psi_{n2}^0, \dots, \psi_{nk}^0$ дают одно и то же значение энергии этого состояния $\varepsilon_n^{(0)}$, вырожденного k раз. Будем теперь, в отличие от предыдущего параграфа, искать решение возмущенного состояния номер n в виде разложения по собственным функциям этого же невозмущенного состояния:

$$\psi_n = C_{n1} \psi_{n1}^0 + C_{n2} \psi_{n2}^0 + \dots + C_{nk} \psi_{nk}^0.$$

Повторив процедуру подстановки в (14.4), умножения на ψ_{np}^* и интегрирования, придём к выражению, повторяющемуся по форме (14.6):

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{E}_n^{(1)} \cdot C_{np} &= \sum_{q=1}^k V_{pq} C_{nq}, \\ V_{pq} &= \int_V (\psi_{np}^0)^\dagger \cdot \hat{V} \cdot (\psi_{nq}^0) \cdot d^3 r \equiv \langle x_{np} | \hat{V} | x_{nq} \rangle. \end{aligned} \quad (14.13)$$

Поскольку

$$C_{np} = \sum_{q=1}^k C_{nq} \cdot \delta_{pq}, \quad \delta_{pq} = \begin{cases} 1, & p = q, \\ 0, & p \neq q, \end{cases}$$

то в уравнении (14.13) можно оба члена объединить под знаком суммы:

$$\sum_{q=1}^k (V_{pq} - \delta\varepsilon^{(l)} \cdot \delta_{pq}) \cdot C_{nq} = 0.$$

Выписав все такие неравенства для q от 1 до k , видим, что мы пришли к системе линейных алгебраических уравнений для коэффициентов C_{nq} . Такая система имеет, как известно, ненулевое решение, если её детерминант равен нулю, т.е.

$$\text{Det} \equiv \begin{vmatrix} V_{11} - \delta\varepsilon^{(l)} & V_{12} & \dots & V_{1k} \\ V_{21} & V_{22} - \delta\varepsilon^{(l)} & \dots & V_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ V_{k1} & V_{k2} & \dots & V_{kk} - \delta\varepsilon^{(l)} \end{vmatrix} = 0. \quad (14.14)$$

Это есть уравнение k -го порядка для искомой поправки $\delta\varepsilon^{(l)}$. Уравнение (14.14) называют *секулярным*, или *вековым* (от франц. *siecle* – век), т.к. впервые оно появилось в небесной механике в задачах о так называемых вековых неравенствах в движении планет. Пример его решения рассмотрен в задаче 14.1 [8].

Задача 14.1. Найти расщепление уровня $n=2$ атома водорода под действием электрического поля (эффект Штарка, § 18.2).

Оператор возмущения в данном случае есть энергия электрического диполя, образованного ядром и электроном атома во внешнем поле \vec{E} :

$$U = -(\vec{d}, \vec{E}) = -e \cdot \vec{r} \cdot E \cdot \cos\theta, \quad \vec{E} = \vec{e}_z \cdot E,$$

где θ – угол между векторами \vec{d} и \vec{E} , направление оси z выбрано вдоль вектора \vec{E} (рис. 13.2). Используем собственные функции атома водорода (13.46), (13.48) и (13.49), пронумеровав подуровни с разными ℓ и m следующим образом:

$$2S_0 \rightarrow 1, 2P_0 \rightarrow 2, 2P(+1) \rightarrow 3, 2P(-1) \rightarrow 4.$$

Из всех элементов V_{ik} в секулярном уравнении (14.14) отличны от нуля лишь два, V_{12} и V_{21} , содержащие под интегралом произведения $\psi_{2S_0} \cdot U \cdot \psi_{2P_0}^*$ и $\psi_{2P_0} \cdot U \cdot \psi_{2S_0}^*$. Остальные дают нуль при интегрировании по θ и φ . Воспользовавшись значением интеграла (13.44), найдём

$$V_{12} = V_{21} = - \int_0^\pi r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \frac{e^{-r/a_0}}{32\pi r_0^3} \cdot \left(2 - \frac{r}{r_0}\right) \cdot e \cdot E \cdot r \cdot \cos\theta \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \cos\theta \cdot d\theta = 3e \cdot r_0 \cdot E.$$

Вековое уравнение в этом случае сводится к определителю 4-го порядка:

$$\begin{vmatrix} -\delta\varepsilon^{(l)} & 3e \cdot r_0 \cdot E & 0 & 0 \\ 3e \cdot r_0 \cdot E & -\delta\varepsilon^{(l)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\delta\varepsilon^{(l)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\delta\varepsilon^{(l)} \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрыв определитель, получим

$$(\delta\varepsilon^{(l)})^2 \cdot ((\delta\varepsilon^{(l)})^2 - (3e \cdot r_0 \cdot E)^2) = 0.$$

Отсюда

$$\delta\varepsilon_{1,2}^{(l)} = \pm 3e \cdot r_0 \cdot E, \quad \delta\varepsilon_{3,4}^{(l)} = 0.$$

Таким образом, уровень $n=2$ расщепляется на три подуровня, один из которых, не сместившийся по энергии ($\delta\varepsilon_3^{(l)} = \delta\varepsilon_4^{(l)} = 0$), двукратно вырожден, а два других смещены на $\delta\varepsilon_1^{(l)} = +3e \cdot r_0 \cdot E$ и $\delta\varepsilon_2^{(l)} = -3e \cdot r_0 \cdot E$.

Из этого решения ясно также, что уровень 1S, для которого вырождение по ℓ отсутствует, не испытывает расщепления в электрическом поле (в линейном по полю приближении).

§ 14.2. Спин-орбитальное взаимодействие и тонкая структура атомных уровней

Физика взаимодействия спина электрона с электрическим полем ядра достаточно просто объясняется на языке классической электродинамики. Электрон, движущийся (в модели Бора!) по орбите со скоростью \vec{v} , удерживается в атоме электрическим полем ядра, которое, как мы видели, определяет в нулевом приближении энергию состояния атома. В системе электрона, движущегося со скоростью \vec{v} , электрическое поле ядра (и остальной части электронной оболочки) создает магнитное поле \vec{B} , которое действует на магнитный момент электрона. Энергия этого взаимодействия приводит к изменению энергии состояния атома. Это и есть так называемое *спин-орбитальное взаимодействие* – электрон в орбитальном движении взаимодействует с электрическим полем ядра благодаря наличию у электрона спина и, соответственно, магнитного момента μ_e .

Оценим величину такого взаимодействия. В системе электрона, а правильнее говоря – в мгновенно сопутствующей инерциальной системе (т.е.

системе, движущейся равномерно и прямолинейно с мгновенной скоростью электрона \vec{v}), компоненты электромагнитного поля определяются известными преобразованиями Лоренца для поля. В случае $v \ll c$ имеем

$$\vec{E}' \approx \vec{E} = Ze \cdot \frac{\vec{r}}{r^3}, \quad \vec{B}' \approx -\frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{E}], \quad (14.15)$$

где \vec{E} – электрическое поле атома, в котором движется электрон. Начало отсчёта лабораторной системы поместим в центр масс атома. Тогда (рис. 13.1) \vec{r} – вектор от ядра (m_2) к электрону (m_1). Скорость электрона $v \ll c$, поскольку, как мы уже знаем, энергия электрона в атоме порядка 10 эВ для водорода и может достигать лишь нескольких кэВ у тяжелых элементов ($Z \gg 1$). Поэтому лоренц-фактор $\gamma \approx 1 + v^2/2c^2$, а значит, с точностью до v^2/c^2 можно принять $\gamma \approx 1$. С такой же точностью совпадают и расстояния в системах электрона и лабораторной. В результате на электрон в его системе действует сила

$$\vec{F}' = -\nabla V'(\vec{r}), \quad \text{где } V'(\vec{r}) = -(\vec{\mu}_e, \vec{B}'(\vec{r}))$$

есть энергия взаимодействия магнитного момента электрона $\vec{\mu}_e$ с магнитным полем в его системе. Подставив сюда \vec{B}' из (14.15), найдём

$$\vec{F}' \approx -\frac{Ze}{c} \cdot \nabla \left(\vec{\mu}_e, \left[\vec{v}, \frac{\vec{r}}{r^3} \right] \right). \quad (14.16)$$

В модели Бора (§ 2.2), где электроны движутся по орбитам, нетрудно получить, что сила \vec{F}' направлена вдоль градиента функции $1/r^2$ (рис. 14.1):

$$\vec{F}' = \frac{Ze}{c} \cdot \mu_e v \cdot \cos \theta \cdot \nabla \left(\frac{1}{r^3} \right) = \frac{2Ze \mu_e v \cos \theta}{c} \cdot \frac{\vec{r}}{r^4},$$

т.е. вдоль радиуса-вектора \vec{r} . А это означает, что сила \vec{F}' складывается (векторно) с силой электростатического притяжения, изменяя энергию электрона в атоме.

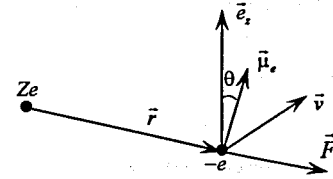


Рис. 14.1. Спин-орбитальное взаимодействие в атоме Бора. \vec{e}_z – единичный вектор, ортогональный плоскости векторов \vec{v} и \vec{r}

Но нам нужно знать энергию взаимодействия электрона с полем в лабораторной системе. Её найдём, вспомнив, что в нерелятивистском приближении ($\gamma = 1$) компоненты вектора трёхмерной силы сохраняются при переходе из одной инерциальной системы в другую. Поэтому сила в лабораторной системе равна силе в системе электрона:

$$\vec{F} \approx \vec{F}'$$

с точностью до v^2/c^2 . Соответственно, равны и значения энергии взаимодействия

$$V(\vec{r}) = V'(\vec{r}).$$

Таким образом,

$$V(\vec{r}) = \frac{Ze}{c} \left(\vec{\mu}_e, \left[\vec{v}, \frac{\vec{r}}{r^3} \right] \right).$$

Скорость электрона в лабораторной системе выразим через скорость частицы с приведённой массой \vec{r} . Из (13.5), положив $\vec{r}_c = 0$ (начало отсчёта в точке центра масс), найдём

$$\vec{v} = \vec{r}_{cl} = \frac{m_{\text{nucl}}}{m_e + m_{\text{nucl}}} \cdot \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m_e},$$

где \vec{p} – импульс частицы с приведённой массой. Оператор возмущения, соответствующий функции $V(\vec{r})$, принимает тогда вид

$$\hat{V}(\vec{r}) = \frac{Ze}{m_e c} \left(\vec{\mu}_e, \left[\hat{\vec{p}}, \frac{\vec{r}}{r^3} \right] \right).$$

Магнитный момент электрона является оператором, т.к. он пропорционален \hat{S} .

Входящий сюда оператор \hat{p} действует, вообще говоря, как на Ψ -функцию, так и на сомножитель \vec{r}/r^3 . Но второе действие даёт нулевой результат, т.к.

$$\frac{\vec{r}}{r^3} = -\nabla \cdot \frac{1}{r} \quad \text{и} \quad [\nabla, \nabla] \cdot \frac{1}{r} = 0. \quad (14.17)$$

Здесь первое соотношение есть не что иное, как равенство кулоновского поля единичного заряда (левая часть) и градиента его потенциала (со знаком минус, правая часть). В справедливости этого равенства легко убедиться и прямым дифференцированием. Второе равенство содержит векторный квадрат вектора ∇ , что равно нулю тождественно¹⁾. В результате сомножители векторного произведения в формуле для $\hat{V}(\vec{r})$ можно поменять местами. Подчеркнём, что перестановка сомножителей векторного произведения, разрешенная в классическом подходе, является некорректной, вообще говоря, в квантовом описании, если один из сомножителей — оператор. В рассмотренном случае эта перестановка возможна.

Векторное произведение

$$[\vec{r}, \hat{p}] = \hat{L},$$

где \hat{L} — оператор момента импульса частицы с приведённой массой. Подставив этот результат и значение $\vec{\mu}_e$ (11.24) в формулу для $\hat{V}(\vec{r})$, приходим к выражению²⁾

$$\hat{V}(\vec{r}) = \frac{Ze^2}{m_e m_0 c^2 r^3} \cdot (\hat{S}_e, \hat{L}). \quad (14.18)$$

Таким образом, задача о спин-орбитальном взаимодействии свелась к оператору возмущения, который содержит операторы спина электрона и моменты импульса частицы с приведённой массой. Отсюда и название — *спин-орбитальное взаимодействие*. Кроме того, этот оператор зависит от расстояния электрон-ядро

¹⁾ Можно рассуждать иначе:

$$\left[\nabla, \frac{\vec{r}}{r^3} \right] = \text{rot} \vec{E} \Big|_{q=1} = 0,$$

т.к. статическое (!) поле \vec{E} подчиняется уравнениям Максвелла.

²⁾ В этом и следующем параграфах примем $g_e = 2$.

(т.е. положения частицы с приведённой массой). Всё это даёт основание утверждать, что в качестве волновых функций невозмущённого состояния можно выбрать "водородные" функции, полученные в § 13.3. Теперь можно использовать результаты предыдущего параграфа.

Запишем значение сдвига энергии состояния, вызванное спин-орбитальным взаимодействием:

$$\delta \mathcal{E}_{nl} = \frac{Ze^2}{m_e m_0 c^2} \cdot \int \frac{1}{r^3} \cdot (\psi_{nl}^0)^* (\hat{S}, \hat{L}) \cdot \psi_{nl}^0 \cdot d^3 r. \quad (14.19)$$

Выражение для произведения (\hat{S}, \hat{L}) под интегралом найдем из равенства

$$(\hat{S} + \hat{L})^2 = \hat{S}^2 + 2(\hat{S}, \hat{L}) + \hat{L}^2.$$

Дальше учтём, что $\hat{S} + \hat{L} = \hat{J}$ — оператор полного момента электрона (11.3).

Поэтому запишем

$$2(\hat{S}, \hat{L}) = (\hat{S} + \hat{L})^2 - \hat{S}^2 - \hat{L}^2 = \hat{J}^2 - \hat{S}^2 - \hat{L}^2. \quad (14.20)$$

Поскольку ψ_{nl}^0 — функция невозмущённого состояния, действуя на неё, оператор (14.20) "извлекает" собственные значения операторов $\hat{J}^2, \hat{S}^2, \hat{L}^2$. В результате находим

$$2(\hat{S}, \hat{L}) \cdot \psi_{nl}^0 = \hbar^2 \cdot [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] \cdot \psi_{nl}^0. \quad (14.21)$$

Подставив (14.21) в (14.19), окончательно получим значение сдвига энергии уровня n, ℓ, j , вызванное спин-орбитальным взаимодействием

$$\delta \mathcal{E}_{nlj} = \frac{Ze^2 \hbar^2}{m_e m_0 c^2} \cdot [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] \cdot \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl}. \quad (14.22)$$

Вычисление $\left\langle r^{-3} \right\rangle_{nl}$ иллюстрирует задача 14.2 ниже. Таким образом, мы "попутно" выяснили, что значения энергии уровней n, ℓ зависят ещё и от величины квантового числа j (11.4). Обратим внимание на то обстоятельство, что здесь все время речь шла о спине и орбитальном моменте *одного электрона*, т.е.

наш вывод справедлив для атома водорода и водородоподобных атомов и ионов. Случай сложных атомов рассмотрен в гл. 15.

Выражение (14.22) удобно привести к виду с явно выраженными размерностями. Для этого поделим и умножим его на r_0^3 (см. (13.25)) и, учитывая (2.8) и (13.33), запишем значение энергии спин-орбитального взаимодействия

$$\delta\epsilon_{nj} = \frac{\alpha^2 Z \cdot \epsilon_0}{1 + \frac{m_e}{m_{\text{nucl}}}} \cdot K_{jts} \left\langle \left(\frac{r_0}{r} \right)^3 \right\rangle_{nl}, \quad K_{jts} = j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1). \quad (14.23)$$

Дальше мы увидим, что учёт релятивистского эффекта – *прецессии Томаса* – уменьшает эту величину вдвое (так называемая "томасовская двойка"). Константы α и ϵ_0 определены в § 2.2. Из этого выражения ясно, почему α имеет название "*постоянная тонкой структуры атомных спектров*". Как оказалось позднее, этот параметр, введенный для описания спектров атомов, играет фундаментальную роль в теории электромагнитного взаимодействия – квантовой электродинамике (КЭД).

Из полученного выражения очевидно, что для S -состояний этот сдвиг энергии отсутствует

$$\delta\epsilon_{n0} = 0,$$

тогда как для $\ell \geq 1$ выражение в квадратных скобках в формуле (14.22) принимает для каждого ℓ несколько значений, в соответствии с правилом сложения моментов (11.4). Поэтому имеет место не только сдвиг, но и расщепление уровней. Тем самым снимается вырождение уровней с одинаковым n .

Задача 14.2. Оценить величину тонкого расщепления $2P$ -уровня атома водорода, воспользовавшись формулой (14.23).

Начнем с коэффициента K_{jts} . В соответствии с (11.4) квантовое число j в состоянии с $\ell = 1$ может принимать два значения:

$$j_p = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \quad K_{jts} = 1, -2.$$

Для вычисления $\left\langle r_{2p}^{-3} \right\rangle$ используем первые из выражений для ψ_{2p} в (13.48), (13.49) и учтем ортонормированность функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Тогда (см. (13.49)) найдем

$$\left\langle \left(\frac{r_0}{r} \right)^3 \right\rangle_{2p} = \frac{1}{24} \int_0^\infty e^{-x} x dx = \frac{1}{24}.$$

В результате

$$\delta\epsilon_{2p} = \begin{cases} 3,0 \cdot 10^{-5} \text{ эВ,} \\ -1,5 \cdot 10^{-5} \text{ эВ.} \end{cases}$$

Таким образом, расщепление уровней $2P$ с $j = 3/2$ и $1/2$ составляет по этим оценкам $4,5 \cdot 10^{-5}$ эВ. Экспериментальное значение равно $4,1 \cdot 10^{-5}$ эВ (см. § 14.5 ниже).

Значение $\delta\epsilon_{nj}$ (14.23) не учитывает релятивистские эффекты, имеющие порядок величины $(v/c)^2$, где v – скорость электрона в атоме. Строго учесть оба эффекта позволяет релятивистское уравнение Дирака (§ 11.3), которое в случае атома водорода интегрируется точно (что выходит за рамки курса). Укажем лишь на происхождение этих поправок.

Энергия $\delta\epsilon_{nj}$ (14.23) имеет порядок

$$\delta\epsilon_{nj} \sim \alpha^2 \epsilon_0 = \alpha^4 \frac{mc^2}{2} = \left(\frac{\hbar}{m_e c R_{\text{Bohr}}} \right)^4 \cdot \frac{m_e c^2}{2}.$$

Поскольку момент импульса электрона в атоме $|\vec{r}, \vec{p}| \sim \hbar \ell$, то $p \sim \hbar / R_{\text{Bohr}}$. Поэтому

$$\delta\epsilon_{nj} \sim \frac{p^4}{m_e^3 c^2},$$

а эта величина того же порядка, что и второй член разложения релятивистской кинетической энергии частицы по импульсу:

$$\epsilon_{\text{kin}} = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} \dots$$

Гамильтониан в уравнении Шрёдингера есть оператор кинетической энергии, поэтому его следует дополнить вторым слагаемым с учётом сделанной оценки:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2}.$$

Ещё одна релятивистская поправка связана с так называемой *прецессией Томаса*. Её смысл поясняет задача 14.7: появляющееся в системе электрона вращение его собственного

момента (спина) даёт вклад в полную энергию электрона. Можно оценить порядок этой поправки, вспомнив, что энергия вращающегося тела ("волчка") есть

$$\delta\epsilon_{\text{в.р.}} = \frac{1}{2} \sum_i \Delta m_i \cdot v_i^2,$$

где Δm_i и v_i — масса элемента тела и его скорость относительно оси вращения:

$$\vec{v}_i = [\vec{\omega}_s, \vec{r}_i],$$

$\vec{\omega}_s$ — угловая скорость вращения, \vec{r}_i — расстояние от элемента до оси. Тогда

$$\delta\epsilon_{\text{в.р.}} = \frac{1}{2} \sum_i \Delta m_i ([\vec{\omega}_s, \vec{r}_i], \vec{v}_i) = \frac{1}{2} \left(\vec{\omega}_s, \sum_i \Delta m_i [\vec{r}_i, \vec{v}_i] \right) = \frac{1}{2} (\vec{\omega}_s, \vec{M}_s),$$

где \vec{M}_s — момент импульса тела относительно оси вращения. Применив это соотношение

классической механики к электрону, т.е. приняв $\vec{M}_s \equiv \vec{S}$, получим

$$\delta\epsilon_{\text{в.р.}} = \frac{1}{2} (\vec{\omega}_s, \vec{S}).$$

Скорость прецессии Томаса (задача 14.7 ниже) в системе частицы равна

$$\vec{\omega}_s \approx \frac{v^2}{2c^2} \cdot \vec{\omega}_e,$$

где в данном случае $\vec{\omega}_e$ — угловая скорость вращения электрона на орбите (модель атома Бора):

$$\vec{\omega}_e = \frac{[\vec{r}, \vec{v}]}{r^2} = \frac{\vec{L}}{m_0 r^2}.$$

Кроме того (§ 2.2),

$$v^2 = \frac{Ze^2}{m_0 r^2}.$$

В результате получаем

$$\delta\epsilon_{\text{в.р.}} = \frac{Ze^2}{4m_0^2 c^2 r^3} \cdot (\vec{S}, \vec{L}).$$

Осталось ещё понять, с каким знаком входит $\delta\epsilon_{\text{в.р.}}$ в энергию взаимодействия электрона с ядром.

Очевидно, со знаком "-", т.к. эта энергия прецессии черпается из кинетической энергии электрона. Полученный "полуклассический" результат вдвое меньше квантового. Поэтому учёт прецессионной поправки приводит к появлению в (14.23) множителя 1/2, что и отмечено выше.

Решение уравнения Дирака даёт ещё одно слагаемое, которое не удаётся получить на основе (нерелятивистского) уравнения Шрёдингера (см. [5], § 33). Окончательно оператор энергии тонкого расщепления имеет вид (см. [5], формулы (33.12), (34.1))

$$\hat{V}_{nj} = -\frac{(\hat{p})^4}{8m_0^3 c^2} + \frac{Ze^2}{2m_0 m_0 c^2 r^3} \cdot \left(\hat{S}_s, \hat{L} \right) + \frac{\pi}{2} \cdot \frac{Ze^2 \hbar^2}{m_0^2 c^2} \cdot \delta(\vec{r}). \quad (14.24)$$

Вычисление матричных элементов (14.19) этого оператора даёт значение сдвига уровня (n, j) тонкой структуры

$$(\delta\epsilon_{nj})_{\text{Dirac}} = -\alpha^2 Z^4 \cdot \frac{\epsilon_0}{n^3} \cdot \left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right]. \quad (14.25)$$

Задачи 14.3–14.6 поясняют, как возникла четвертая степень Z .

Задача 14.3. Найти выражение для волновой функции электрона в поле точечного заряда $+Ze$ через волновую функцию атома водорода.

Зарядовое число Z входит только в потенциал $U(r)$ (13.16), поэтому угловая часть ψ -функции от Z не зависит. Введем в уравнении (13.24) для радиальной части безразмерную длину

$$X = \frac{r}{r_0} \cdot Z, \quad (14.26)$$

для этого умножим уравнение (13.24) на r_0^2/Z^2 , подставив в него $U(r)$ (13.16). Уравнение (13.24) приведём к виду

$$\frac{1}{X^2} \cdot \frac{d}{dX} \left(X^2 \frac{dR}{dX} \right) - \left[\xi^2 - \frac{2}{X} + \frac{\ell(\ell+1)}{X^2} \right] \cdot R = 0, \quad (14.27)$$

$$\xi^2 = -\frac{2E \cdot \hbar^2}{Z^2 m_0 e^4} = -\frac{E}{Z^2 \epsilon_0}.$$

Нетрудно видеть, что уравнения (14.27) и (13.27) совпадают при $\alpha_0 = 1$ и $\xi = \kappa$. Таким образом, волновые функции для электрона в поле заряда Ze можно выразить через волновые функции атома водорода, записав

$$R_Z(r) = C \cdot R_1(X),$$

где $R_1(X)$ — радиальная часть соответствующей "водородной" ψ -функции, в которой координата r заменена на X (14.26), а константа C находится из условий нормировки функции $R_Z(r)$:

$$1 = \int_0^{\infty} R_Z^2(r) \cdot r^2 dr = C^2 \cdot \left(\frac{r_0}{Z} \right)^3 \cdot \int_0^{\infty} R_1^2(X) \cdot X^2 \cdot dX = C^2 \left(\frac{r_0}{Z} \right)^3.$$

Последнее равенство записано на том основании, что функция $R_1(X)$ определена в области $0 \leq X \leq \infty$ и полностью совпадает по виду с радиальной частью "водородной" ψ -функции, определённой в области $0 \leq r \leq \infty$ и нормированной на единицу. Отсюда

$$C = \left(\frac{Z}{r_0} \right)^{3/2},$$

и

$$R_z(r) = \left(\frac{Z}{r_0}\right)^{3/2} \cdot R_l(X). \quad (14.28)$$

Задача 14.4. Выразить $\langle r_{nl}^{-3} \rangle$ для электрона в поле точечного заряда Ze через ту же величину для атома водорода.

Искомая величина с учётом (14.28) равна

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r_{nl}^3} \right\rangle &= \int \psi_z^*(r, \theta, \varphi) \cdot \frac{1}{r^3} \cdot \psi_z(r, \theta, \varphi) \cdot r^2 dr \cdot d\Omega = \\ &= \left(\frac{Z}{r_0}\right)^3 \cdot \int \psi^*(x, \theta, \varphi) \cdot \psi(x, \theta, \varphi) \cdot \frac{dX}{X} \cdot d\Omega = \left(\frac{Z}{r_0}\right)^3 \cdot C_{nl}, \end{aligned} \quad (14.29)$$

где C_{nl} – некоторое число, зависящее от n и ℓ . Отсюда, в частности, следует, что при переходе от атома водорода к атому с ядром Ze в выражениях (14.23), (14.25) появляется множитель Z^4 .

Задача 14.5. Оценить релятивистскую поправку в выражении для энергии уровня атома, связанную с релятивистской зависимостью энергии электрона от скорости, воспользовавшись боровской моделью атома.

Записав выражение для энергии (2.6) с учетом релятивистской зависимости энергии от скорости

$$\varepsilon_n = \frac{\gamma m_0 v_n^2}{2} - \frac{Ze^2}{r_n},$$

где n – номер уровня, $\gamma = (1 - v_n^2/c^2)^{-1/2} \approx 1 + (v_n^2/2c^2)$, и учитывая равенство (2.2) для стационарной орбиты

$$\gamma \frac{m_0 v_n^2}{2} = \frac{Ze^2}{r_n^2},$$

найдем

$$\varepsilon_n = -\frac{\gamma m_0 v_n^2}{2} \approx -\frac{m_0 v_n^2}{2} \left(1 + \frac{v_n^2}{2c^2}\right) = -\frac{Z^2 \varepsilon_0}{n^2} \left(1 + \frac{v_n^2}{2c^2}\right).$$

Далее учтем, что

$$m_0 v_n r_n = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)},$$

и, сохраняя поправки порядка v_n^2/c^2 , запишем с учетом выражения (2.4)

$$\delta\varepsilon = -\frac{Z^2 \varepsilon_0}{n^2} \cdot \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{m_0^2 r_n^2 c^2} = -\alpha^2 Z^4 \varepsilon_0 \cdot \frac{\ell(\ell+1)}{n^6} = \frac{\alpha^2 Z^4 \cdot \varepsilon_0}{n^4}. \quad (14.30)$$

Конечно, эта оценка носит качественный характер, но правильно передает порядок величины и зависимость от параметров e , m_0 , Z , \hbar .

Задача 14.6. Выразить матричные элементы операторов $\left(\hat{p}\right)_z^4$ и $\delta(\vec{r})$ из (14.24) для водородоподобного атома (иона) с зарядом Ze через "водородные" ψ -функции.

Запишем

$$\left\langle \left(\hat{p}\right)_z^4 \right\rangle = \hbar^4 \int \psi_z^*(\vec{r}) \cdot \nabla^4 \psi_z(\vec{r}) \cdot r^2 dr \cdot d\Omega$$

и учтём, что при обозначении (14.26)

$$\begin{aligned} \nabla^4 &= \Delta^2 = \left(\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right)^2 = \\ &= \frac{Z^4}{r_0^4} \left(\frac{1}{X^2} \cdot \frac{\partial}{\partial X} \left(X^2 \frac{\partial}{\partial X}\right) + \frac{1}{X^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{X^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right)^2 = \\ &\equiv \frac{Z^4}{r_0^4} \cdot \nabla_X^4. \end{aligned}$$

Тогда с учётом (14.26) и (14.28) найдём

$$\left\langle \left(\hat{p}\right)_z^4 \right\rangle = \hbar^4 \frac{Z^4}{r_0^4} \int \psi_z^*(X) \cdot \nabla_X^4 \psi_z(X) \cdot X^2 dX \cdot d\Omega = \frac{Z^4}{r_0^4} \cdot \left\langle \left(\hat{p}\right)_{Z=1}^4 \right\rangle.$$

Для оператора $\delta(\vec{r})$ – трёхмерной δ -функции, вспомним, что (§ 4.4)

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \cdot \delta(x),$$

соответственно,

$$\delta(a\vec{r}) = \delta(ax) \cdot \delta(ay) \cdot \delta(az) = \frac{1}{|a|^3} \cdot \delta(\vec{r}).$$

Поэтому, аналогично предыдущему случаю, получим

$$\left\langle \delta(\vec{r}) \right\rangle_z = \frac{Z^3}{r_0^3} \cdot \left\langle \delta(\vec{r}) \right\rangle_{Z=1}.$$

Таким образом, первое и третье слагаемое оператора (14.24), так же, как и второе (задача 14.4), дают коэффициент Z^4 в значении $\delta\varepsilon_{nl}$.

Задача 14.7. Стержень покоится в системе, которая движется по окружности радиусом R со скоростью $v = \omega R \sim c$ ("релятивистский ящик"). Найти угловую скорость вращения стержня в этой системе "ящика".

Указание: Заменить окружность многоугольником с одинаковыми сторонами, считая, что скорость \vec{v} постоянна по величине и скачком изменяет своё направление в углах многоугольника. Рассмотреть вначале случай стержня, лежащего в плоскости орбиты.

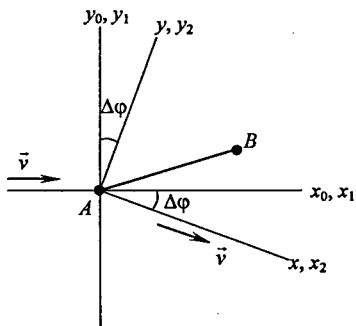


Рис. 14.2. Выбор систем координат: (x_0, y_0) и (x, y) — координаты в лабораторной системе, (x_1, y_1) и (x_2, y_2) — в движущихся

Пусть в момент времени $t=0$ в лабораторной системе (ЛС) стержень AB занимает положение, в котором его точка A находится на стыке сторон многоугольника, а точка B в некоторой точке плоскости орбиты "ящика". Введём системы координат (рис. 14.2) в лабораторной системе x_0, y_0, t_0 до "поворота", x, y, t — после и мгновенно сопутствующие системы в системе "ящика" x_1, y_1, t_1 до "поворота", x_2, y_2, t_2 — после. Все четыре оси x направлены вдоль соответствующих векторов \vec{v} . Эффект, который мы ожидаем получить, связан с одновременностью и "неодновременностью" событий в разных системах. Здесь под событием понимаем измерение координат концов стержня A и B в разных системах.

Выберем системы координат так, что их начала совпадают с точкой стержня A в момент времени

$$t_0^A = t_1^A = t_2^A = t^A = 0.$$

Нас интересует положение точки B стержня в системе 2 (x_2, y_2, t_2) . Иными словами, в момент времени

$$t_2^B = t_2^A = 0$$

наблюдатель, находящийся в системе 2, производит одновременное измерение координат точек A и B стержня (это одновременные события!). Угол поворота стержня при прохождении стыка сторон многоугольника найдём, вычислив координаты точки B в системе 1 (x_1, y_1, t_1) . Как будет

видно из этих вычислений, события $(x_2, y_2, t_2)_B$ и $(x_1, y_1, t_1)_B$ не одновременны (!), и в этом существо эффекта, который мы анализируем.

Чтобы добраться до точки B в системе 1, произведём последовательные преобразования координат точки B из системы 2 в ЛС (x, y, t) , затем в ЛС (x_0, y_0, t_0) и, наконец, опять в движущуюся систему 1. Опустив индекс B , запишем

$$\begin{aligned} x &= \gamma(x_2 + vt_2) = \gamma x_2, \quad \text{т.к. } t_2^B = 0, \\ y &= y_2, \\ t &= \gamma\left(t_2 + \frac{v}{c^2} \cdot x_2\right) = \gamma \cdot \frac{v}{c^2} \cdot x_2. \end{aligned}$$

Далее в ЛС

$$\begin{aligned} x_0 &= x \cdot \cos \varphi + y \cdot \sin \varphi \approx x + y \cdot \Delta \varphi, \\ y_0 &= -x \cdot \sin \varphi + y \cdot \cos \varphi \approx -x \cdot \Delta \varphi + y, \\ \Delta \varphi &\ll 1. \end{aligned}$$

Затем

$$\begin{aligned} x_1 &= \gamma(x_0 - vt_0), \\ y_1 &= y_0, \\ t_1 &= \gamma\left(t_0 - \frac{v}{c^2} \cdot x_0\right). \end{aligned}$$

Последовательной подстановкой в последующие равенства значений координат из предыдущих найдём

$$\begin{aligned} x_1 &= x_2 + y_2 \cdot \gamma \cdot \Delta \varphi, \\ y_1 &= -x_2 \cdot \gamma \cdot \Delta \varphi + y_2. \end{aligned}$$

Угол поворота стержня в движущейся системе 2 относительно его положения в системе 1, очевидно, равен

$$\Delta \alpha = \arctg \frac{y_2}{x_2} - \Delta \varphi - \arctg \frac{y_1}{x_1} = \arctg \frac{x_1 y_2 - x_2 y_1}{x_1 x_2 - y_1 y_2} - \Delta \varphi.$$

Подставив сюда значения x_1, y_1 из последних равенств, приходим к результату

$$\Delta \alpha = \arctg(\gamma \cdot \Delta \varphi) - \Delta \varphi.$$

Поскольку угол $\Delta \varphi$ можно выбрать сколь угодно малым, имеем

$$\Delta \alpha = (\gamma - 1) \cdot \Delta \varphi.$$

За оборот ($n \cdot \Delta \varphi = 2\pi$) стержень во вращающейся системе повернётся на угол

$$\alpha = (\gamma - 1) \cdot 2\pi.$$

"Трёхмерность" положения стержня (угол с плоскостью орбиты не равен нулю) не изменит полученный результат, т.к. z -координата точки B имеет одно и то же значение во всех четырёх системах и не входит поэтому в уравнения, записанные выше. Иным словом, на угол $\Delta \alpha$ поворачивается проекция стержня на плоскость орбиты.

Рассмотренный эффект является принципиально релятивистским:

$$\alpha \approx \frac{v^2}{c^2} \cdot \pi \quad \text{при } v \ll c$$

и известен под названием "прецессии Томаса" (L. Thomas, 1926).

В заключение этого параграфа еще раз подчеркнем, что здесь рассматривается физика атома в *одноэлектронном приближении*. К случаю более сложных, многоэлектронных атомов мы обратимся ниже в гл. 15.

§ 14.3. Сверхтонкая структура атомных уровней

До сих пор мы считали ядро точечной частицей с зарядом $+Ze$, и в этом приближении получили основную и тонкую структуры атомных уровней. Учет *конечности размеров ядра* и наличия у него *магнитного момента* приводит к появлению *сверхтонкой структуры* уровней.

Начнем со второго из указанных эффектов. Пусть ядро обладает собственным магнитным моментом μ_{nucl} , который удобно представить в виде (см. § 11.3)

$$\mu_{\text{nucl}} = G_{\text{nucl}} \cdot \hbar \cdot I = \mu_N g_{\text{nucl}} \cdot I, \quad (14.31)$$

где $\hbar I$ – спин ядра, μ_N – ядерный магнетон, g_{nucl} – безразмерное гироманнитное отношение данного ядра. Значения параметров g_{nucl} и I существенно зависят от состава ядра – числа протонов и нейтронов, и его структуры, т.е. взаимной ориентации спинов, значений спиновых и орбитальных моментов нуклонов в ядре, и т.д. Например, ядро гелия (α -частица) состоит из двух протонов и двух нейтронов, ориентированных так, что $I=0$. Соответственно, $\mu_\alpha=0$. То же имеет место у ядер ^{12}C (6 протонов и 6 нейтронов), ^{16}O (8 протонов и 8 нейтронов) и других, так называемых *чётно-чётных* ядер, в которых как число протонов, так и число нейтронов чётные и одинаковые. Простейшее ядро – дейтрон, состоящее из протона и нейтрона, имеет спин $I=1$ и его гироманнитное отношение лишь несколько отличается от единицы:

$$\mu_{\text{Deuteron}} = 0,977772 \cdot \mu_N.$$

В то же время ядро азота ^{14}N (7 протонов и 7 нейтронов), также обладающее спином $I=1$, имеет магнитный момент

$$\mu_{\text{Nitrogen}} = 0,403562 \cdot \mu_N.$$

Такое расхождение указывает на сложный механизм формирования магнитных моментов ядер, что является предметом изучения ядерной физики, достаточно развитым в наше время. Для оценки эффекта магнитного сверхтонкого расщепления нам достаточно приведенных сведений.

Вспользуемся вначале квазиклассическим подходом. Ядро, обладающее магнитным моментом $\vec{\mu}_{\text{nucl}}$, создает в пространстве магнитное поле дипольной конфигурации

$$\vec{B}_{\text{nucl}}(\vec{r}) = -\frac{\vec{\mu}_{\text{nucl}}}{r^3} + \frac{3(\vec{r}, \vec{\mu}_{\text{nucl}})}{r^5} \cdot \vec{r}, \quad (14.32)$$

где \vec{r} – радиус-вектор из точки нахождения ядра в точку наблюдения. Энергия взаимодействия электрона с этим магнитным полем (см. (11.26)) складывается из двух частей – взаимодействия собственного магнитного момента электрона (11.24) с полем \vec{B}_{nucl}

$$U_s = -(\vec{\mu}_e, \vec{B}_{\text{nucl}}) \approx \frac{e}{m_e c} \cdot (\vec{S}, \vec{B}_{\text{nucl}}), \quad (14.33)$$

и взаимодействия движущегося электрона как заряженной частицы с этим же полем. Последнее утверждение выглядит, на первый взгляд, некорректным, т.к. известно, что магнитное поле не изменяет кинетическую энергию частицы (сила, действующая на частицу в магнитном поле, всегда перпендикулярна скорости частицы!). Однако мы имеем дело с более сложным случаем – движение электрона в электрическом и магнитном полях ядра, где скорость электрона зависит от расстояния между электроном и ядром, а расстояние изменяется при "включении" магнитного поля. На языке классической электродинамики такое взаимодействие можно описать с помощью модели рамки с током

$$I_e = \frac{e}{2\pi r} \cdot v,$$

помещенной в магнитном поле $\vec{B}(\vec{r})$. Такая "рамка" обладает, как известно из электродинамики, магнитным моментом

$$\vec{\mu}_l = \frac{1}{c} \cdot I_e \cdot S_r \cdot \vec{e}_\perp,$$

где $S_r = \pi r^2$ — площадь рамки, \vec{e}_\perp — единичный вектор, перпендикулярный её плоскости. Отсюда

$$\vec{\mu}_l = \frac{evr}{2c} \cdot \vec{e}_\perp = \frac{e}{2m_e c} \cdot \vec{L},$$

где $\vec{L} = m_e [\vec{r}, \vec{v}]$ — орбитальный момент электрона (10.1) (мы использовали, естественно, приближение круговой орбиты). Таким образом, полный магнитный момент электрона в атоме есть сумма орбитального $\vec{\mu}_l$ и спинового $\vec{\mu}_e$ магнитных моментов электрона

$$\vec{\mu}_{\text{total}} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_e \approx \frac{e}{2m_e c} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S}), \quad g_e \approx 2.$$

Соответственно, энергия магнитного сверхтонкого расщепления описывается выражением

$$U_\mu = -\frac{e}{2m_0 c} \cdot ((\vec{L} + 2\vec{S}), \vec{B}_{\text{nucl}}(\vec{r})).$$

Учитывая, что заряд электрона равен $-e$, получим приближённое выражение для оператора возмущения:

$$\hat{V}(\vec{r}) = \hat{U}_\mu \approx \frac{e}{2m_e c} \cdot ((\hat{L} + 2\hat{S}), \vec{B}_{\text{nucl}}(\vec{r})). \quad (14.34)$$

Подчеркнём, что оператор \hat{L} , содержащий ∇ , действует при вычислении энергии возмущения не только на ψ -функцию, но и на $\vec{B}(\vec{r})$.

Теперь, вообще говоря, можно было бы записать выражение для оператора возмущения и повторить процедуру предыдущего параграфа. Однако естественно задать вопрос — насколько полученный результат согласуется с уравнением Паули, которому должен "подчиняться" электрон в электрическом и магнитном полях ядра?

Вначале найдём значение вектора-потенциала для магнитного поля ядра (14.32), т.е. векторную функцию $\vec{A}_{\text{nucl}}(\vec{r})$, удовлетворяющую равенству

$$\text{rot} \vec{A}_{\text{nucl}}(\vec{r}) = \vec{B}_{\text{nucl}}(\vec{r}).$$

Как известно из классической электродинамики, вектор-потенциал "точечного" магнитного диполя $\vec{\mu}$ описывается выражением

$$\vec{A}_\mu(\vec{r}) = \frac{[\vec{\mu}, \vec{r}]}{r^3}. \quad (14.35)$$

Эта формула справедлива для расстояний r между точкой наблюдения и диполем при условии, что $|\vec{r}|$ много больше размера диполя (см., например, [10], с. 63, формула (V.12) и [11], с.85). Нас, однако, интересует поведение магнитного поля ядра при $r \rightarrow 0$, т.к. в S -состоянии волновая функция отлична от нуля при $r = 0$ (см. (13.43), (13.46), (13.50)). И хотя радиальная плотность вероятности (13.55) и в S -состоянии равна нулю (рис. 13.4), соответствующий матричный элемент (14.6) может, вообще говоря, быть не равен нулю (см. задачу 14.8 ниже). Поэтому вычислим значение магнитного поля для вектора-потенциала (14.35), не ограничиваясь большими значениями r . Как известно из векторной алгебры, ротор вектора вычисляется по формуле

$$\text{rot} \vec{A}_\mu = [\nabla, \vec{A}_\mu] = \left[\nabla, \left[\vec{\mu}, \frac{\vec{r}}{r^3} \right] \right].$$

Раскрывая двойное векторное произведение и учитывая, что $\vec{\mu} = \text{const}$, запишем

$$\text{rot} \vec{A}_\mu = \vec{\mu} \left(\nabla, \frac{\vec{r}}{r^3} \right) - (\vec{\mu}, \nabla) \cdot \frac{\vec{r}}{r^3}.$$

Используя первое из равенств (14.17), преобразуем первое слагаемое в выражении для $\text{rot} \vec{A}_\mu$

$$\left(\nabla, \frac{\vec{r}}{r^3} \right) = -(\nabla, \nabla) \cdot \frac{1}{r} = -\Delta \frac{1}{r} = 4\pi \delta(\vec{r}),$$

где $\delta(\vec{r})$ — трёхмерная δ -функция (§ 4.4). Последнее равенство в этой цепочке есть уравнение Пуассона для потенциала единичного точечного заряда.

Второе слагаемое можно распisać в виде суммы

$$\sum_{m=1}^3 \mu_m \frac{\partial}{\partial x_m} \sum_{n=1}^3 \frac{\vec{e}_n x_n}{r^3}.$$

Здесь \vec{e}_n — орты. Произведём дифференцирование, не забывая, что

$$r = \sqrt{\sum_{k=1}^3 x_k^2}.$$

Найдём

$$-(\vec{\mu}, \nabla) \cdot \frac{\vec{r}}{r^3} = -\sum_{m=1}^3 \mu_m \sum_{n=1}^3 \left(\frac{\vec{e}_n \delta_{nm}}{r^3} - 3 \frac{\vec{e}_n x_n x_m}{r^5} \right).$$

После суммирования по n, m ($n = m$) получим

$$-(\vec{\mu}, \nabla) \cdot \frac{\vec{r}}{r^3} = -\frac{\vec{\mu}}{r^3} + \frac{3(\vec{\mu}, \vec{r}) \cdot \vec{r}}{r^5},$$

что совпадает с (14.32). В результате имеем

$$B_{\mu}(\vec{r}) \equiv \text{rot } \vec{A}_{\mu} = 4\pi\vec{\mu} \cdot \delta(\vec{r}) - \frac{\vec{\mu}}{r^3} + \frac{3(\vec{\mu}, \vec{r}) \cdot \vec{r}}{r^5}, \quad (14.36)$$

что совпадает с выражением для магнитного поля точечного магнитного диполя $\vec{\mu}$ (14.32) вне точки $\vec{r} = 0$.

Перейдём теперь к анализу состояния атома водорода с учётом магнитного поля, создаваемого магнитными моментами ядра и электрона. Вектор-потенциал этого поля есть сумма потенциалов полей обеих частиц атома:

$$\vec{A}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \vec{A}_1(\vec{r}_1) + \vec{A}_2(\vec{r}_2) = \frac{[\vec{\mu}_1, \vec{r}_1]}{r_1^3} + \frac{[\vec{\mu}_2, \vec{r}_2]}{r_2^3}.$$

Векторы \vec{r}_1, \vec{r}_2 определены в соответствии с рис. 13.1. Поместим начало отсчёта в точку C центра масс частиц 1, 2. Тогда из (13.5) следует:

$$\vec{r}_C = 0, \quad \vec{r}_1 = \vec{r}_{C1}, \quad \vec{r}_2 = \vec{r}_{C2}. \quad (14.37)$$

Пока не существенно, какая из двух частиц – ядро, а какая – электрон. Гамильтониан этой системы запишем в виде

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(\vec{r}) + \hat{V}_{nj}(\vec{r}) + \hat{U}_{\mu}(\vec{r}), \quad (14.38)$$

где \hat{p}_1, \hat{p}_2 – операторы импульсов частиц, m_1, m_2 – их массы, $U(\vec{r})$ – энергия кулоновского взаимодействия частиц (13.16), $\hat{V}_{nj}(\vec{\mu})$ – оператор энергии тонкого расщепления (14.24), $\hat{U}_{\mu}(\vec{r})$ – оператор энергии взаимодействия магнитных моментов частиц:

$$\hat{U}_{\mu}(\vec{r}) = -(\vec{\mu}_1, \vec{B}_2(\vec{r})), \quad (14.39)$$

$\vec{B}_2(\vec{r})$ – магнитное поле, создаваемое магнитным моментом $\vec{\mu}_2$ в точке нахождения частицы 1 (см. (14.36)). Далее нужно, как это делалось в § 11.4, заменить операторы импульсов $\hat{p}_{1,2}$ на

операторы обобщённых импульсов $\left(\hat{P}_B\right)_{1,2}$ (11.28). Ясно, что при этом в выражение для оператора

первой частицы нужно подставить значение вектора-потенциала поля второй частицы в точке нахождения первой, и наоборот:

$$\begin{aligned} \hat{p}_1 &\rightarrow \hat{P}_{B1} - \frac{e_1}{c} \cdot \vec{A}_2(\vec{r}), \\ \hat{p}_2 &\rightarrow \hat{P}_{B2} - \frac{e_2}{c} \cdot \vec{A}_1(-\vec{r}), \end{aligned}$$

e_1, e_2 – заряды частиц. Операторы \vec{p}_B в уравнении Шрёдингера (Паули) действуют, как и при выводе (14.18) выше, не только на ψ -функцию, но и на вектор-потенциал. Поэтому слагаемые с $\vec{p}_{1,2}^2$ в (14.38) следует расписать с учётом этого обстоятельства. Пределаем эти преобразования для частицы 1:

$$\left(\hat{P}_{B1} - \frac{e_1}{c} \vec{A}_2\right)^2 = \left(\hat{P}_{B1} - \frac{e_1}{c} \vec{A}_2\right) \cdot \left(\hat{P}_{B1} - \frac{e_1}{c} \vec{A}_2\right) = \left(\hat{P}_{B1}\right)^2 - \frac{e_1}{c} \left\{ \left(\hat{P}_{B1}, \vec{A}_2\right) + \left(\vec{A}_2, \hat{P}_{B1}\right) \right\} + \frac{e_1^2}{c^2} A_2^2. \quad (14.40)$$

При подстановке в уравнение Шрёдингера первое слагаемое в фигурных скобках следует записать в виде суммы двух членов

$$\left(\hat{P}_{B1}, \vec{A}_2\right) \cdot \Psi = \left(\overrightarrow{\hat{P}_{B1}}, \vec{A}_2\right) \cdot \Psi + \left(\vec{A}_2, \hat{P}_{B1}\right) \cdot \Psi.$$

Стрелка-дуга в первом члене означает, что дифференцированию (оператор ∇_1) здесь подвергается только функция $\vec{A}_2(\vec{r})$. Подставив значение \hat{P}_B (11.28) и $\vec{A}(\vec{r})$ (14.35), найдём

$$\left(\overrightarrow{\hat{P}_{B1}}, \vec{A}_2(\vec{r})\right) = -i\hbar \cdot \left(\nabla_1, \frac{[\vec{\mu}_2, \vec{r}]}{r^3}\right) \equiv 0,$$

что следует из (14.17) после перестановки сомножителей ∇ и $\vec{\mu}_2$. Таким образом, в (14.40)

остаются два одинаковых слагаемых, содержащих $\left(\vec{A}_2, \hat{P}_{B1}\right)$. Это произведение можно преобразовать, используя (11.28), следующим образом:

$$\left(\vec{A}_2(\vec{r}), \hat{P}_{B1}\right) = \left(\frac{[\vec{\mu}_2, \vec{r}]}{r^3}, -i\hbar \nabla_1\right) = \left(\frac{\vec{\mu}_2}{r^3}, [\vec{r}, -i\hbar \nabla_1]\right) = \frac{m_1 + m_2}{m_2} \cdot \left(\frac{\vec{\mu}_2}{r^3}, \hat{L}_1\right), \quad (14.41)$$

где $\hat{L}_1 = \left[\vec{r}_{C1}, \hat{P}_{B1}\right]$ – оператор момента импульса частицы 1 в магнитном поле. Для частицы 2 получим аналогичное выражение заменой индексов $1 \leftrightarrow 2$.

Слагаемое с A_2^2 в (14.40) можно отбросить в виду его малости. Действительно, сравнивая члены A_2^2 и $\left(\vec{A}_2, \hat{P}_{B1}\right)$, найдём ($m_1 = m_e, m_2 = m_{\text{nucl}}$)

$$\frac{1}{c} \cdot |e_1 A_2(\vec{r})| \sim \frac{e_1 \mu_2}{c R_{\text{Bohr}}^2} \sim \frac{m_e}{m_{\text{nucl}}} \cdot \alpha^3 \cdot m_e c \ll \left|\hat{P}_{B1}\right| \sim \frac{\hbar}{R_{\text{Bohr}}} \approx \alpha \cdot m_e c,$$

или

$$\alpha^2 \cdot \frac{m_e}{m_{\text{nucl}}} \ll 1.$$

Сравнивая A_1^2 и $\left(\vec{A}_1, \hat{P}_{B2}\right)$, приходим к аналогичному неравенству:

$$\alpha^2 \ll 1.$$

Очевидно, оба условия выполняются, по крайней мере, с точностью до $\alpha^2 \approx 5 \cdot 10^{-5}$. Наконец, учитывая, что $\nabla_1 = -\nabla_2$, запишем (см. (11.28))

$$\frac{(\hat{p}_{B1})^2}{2m_1} + \frac{(\hat{p}_{B2})^2}{2m_2} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta,$$

где Δ – оператор Лапласа по координатам вектора \vec{r} , m_0 – приведённая масса системы двух частиц (13.1).

Теперь можно представить гамильтониан (14.38) в виде суммы членов, убывающих по величине:

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}^0(\vec{r}) + \hat{V}_n(\vec{r}) + \hat{V}_\mu(\vec{r}). \quad (14.42)$$

Здесь $\hat{H}^0(\vec{r})$ – гамильтониан "невозмущённого" атома водорода (см. также задачу 13.2), $\hat{V}_n(\vec{r})$ – оператор энергии тонкого расщепления (14.24), $\hat{V}_\mu(\vec{r})$ – оператор сверхтонкого магнитного расщепления, который найдём, собрав вместе два слагаемых вида (14.41) и $\hat{U}_\mu(\vec{r})$ (14.39):

$$\hat{V}_\mu(\vec{r}) = -\frac{2}{c} \cdot \left\{ \frac{e_1}{2m_1} (\vec{A}_2(\vec{r}), \hat{p}_{B1}) + \frac{e_2}{2m_2} (\vec{A}_1(-\vec{r}), \hat{p}_{B2}) \right\} + \hat{U}_\mu(\vec{r}). \quad (14.43)$$

Подставив сюда $(\vec{A}_2, \hat{p}_{B1})$ и $(\vec{A}_1, \hat{p}_{B2})$ из (14.41) и $\hat{U}_\mu(\vec{r})$ (14.39), окончательно получим

$$\hat{V}_\mu(\vec{r}) = -\frac{1}{m_0 c r^3} \cdot \left\{ e_1 (\hat{\mu}_2, \hat{L}_1) + e_2 (\hat{\mu}_1, \hat{L}_2) \right\} - 4\pi (\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2) \cdot \delta(\vec{r}) + \frac{3(\hat{\mu}_1, \vec{r}) \cdot (\hat{\mu}_2, \vec{r})}{r^5}.$$

Показательно, что и здесь появляется приведённая масса m_0 (13.1). Кроме того, учтено, что $\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2$ – операторы, т.к. они пропорциональны спинам. Моменты импульсов частиц 1 и 2 можно выразить через момент импульса частицы с приведённой массой

$$\vec{L} = [\vec{r}, m_0 \dot{\vec{r}}].$$

Действительно (см. (13.5)),

$$\vec{L}_1 = [\vec{r}_{C1}, m_1 \dot{\vec{r}}_{C1}] = \frac{m_2}{m_1 + m_2} [\vec{r}, m_0 \dot{\vec{r}}] = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \cdot \vec{L}$$

и, аналогично,

$$\vec{L}_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \cdot \vec{L}. \quad (14.44)$$

Поэтому выражение (14.43) можно записать в виде

$$\hat{V}_\mu = -\frac{1}{c r^3} \cdot \left(\frac{e_1}{m_1} \hat{\mu}_2 + \frac{e_2}{m_2} \hat{\mu}_1 \right) \cdot \vec{L} - 4\pi (\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2) \cdot \delta(\vec{r}) + \frac{3(\hat{\mu}_1, \vec{r}) \cdot (\hat{\mu}_2, \vec{r})}{r^5}. \quad (14.45)$$

Этот результат отличается от (14.34) и является точным (см. также [2], задача 1 к § 121). Отметим, что

$$\frac{\mu_2}{m_1} \sim \frac{\mu_1}{m_2} \sim \frac{e\hbar}{m_e m_p c},$$

так что ни одним из слагаемых в первых скобках нельзя пренебречь. Для атома водорода и водородоподобных атомов и ионов

$$e_1 = -e, \quad m_1 = m_e, \quad e_2 = Ze, \quad m_2 \approx A \cdot m_p, \quad \mu_1 = \mu_e \approx -\mu_B, \quad \mu_2 = \mu_{\text{nuc}},$$

A – атомный вес атома, μ_{nuc} – магнитный момент ядра (§ 11.3). Соответственно,

$$\hat{V}_\mu = \frac{e}{c r^3} \cdot \left(\left(\frac{\hat{\mu}_{\text{nuc}}}{m_e} + \frac{Z}{A} \frac{(-\hat{\mu}_e)}{m_p} \right) \cdot \vec{L} \right) - 4\pi (\hat{\mu}_e, \hat{\mu}_{\text{nuc}}) \cdot \delta(\vec{r}) + \frac{3(\hat{\mu}_e, \hat{\mu}_{\text{nuc}})}{r^3} - \frac{3(\hat{\mu}_e, \vec{r}) \cdot (\hat{\mu}_{\text{nuc}}, \vec{r})}{r^5}. \quad (14.46)$$

Заметим, что даже в S -состоянии, где $\vec{L} = 0$, пренебрежение слагаемыми с A_1^2, A_2^2 , сделанное выше, остаётся корректным, т.к. даже наибольшее из них

$$\frac{e^2 A_1^2}{2m_2 c^2} \sim \frac{e^2}{m_p c^2} \cdot \frac{\mu_e^2}{R_{\text{Bohr}}^4} \ll \frac{|\mu_e| \cdot \mu_p}{R_{\text{Bohr}}^3} \sim \frac{m_e}{m_p} \cdot \frac{\mu_e^2}{R_{\text{Bohr}}^3}.$$

Таким образом, отношение этих членов порядка $r_e/R_{\text{Bohr}} \sim 5 \cdot 10^{-5}$.

Далее нужно подставить оператор возмущения в (14.11) и провести соответствующие вычисления. Их удастся сделать для простейшего случая водородоподобных атомов (см. задачу 14.9 и § 14.6 ниже).

В общем случае в волновых функциях можно разделить координатную и спиновую части:

$$\Psi(\vec{r}, s_\alpha, I_\alpha) = \psi(\vec{r}) \cdot \chi(s_\alpha) \cdot \chi(I_\alpha).$$

Каждый оператор действует на "свою" часть, так что можно записать

$$\hat{L}\Psi = \vec{L}\Psi, \quad \hat{S}\Psi = \vec{S}\Psi, \quad \hat{I}\Psi = \vec{I}\Psi,$$

где \hat{S}, \hat{I} – операторы спинов электрона и ядра^{*)}. Вычисление скалярных произведений (\hat{L}, \hat{I}) и (\hat{S}, \hat{I}) и их собственных значений следует производить,

^{*)} Обратим внимание, что спин ядра здесь и далее обозначен произведением символов $\hbar \vec{I}$ (что связано с нежеланием использовать букву i для обозначения спинового числа ядра, т.к. возникает путаница с $i = \sqrt{-1}$).

как и в предыдущем параграфе (см. (14.20), (14.21)). Поскольку магнитное поле ядра

$$B_{\text{nucl}} \sim \frac{\mu_{\text{nucl}}}{r^3},$$

то в результате можно сделать вывод, что по порядку величины сдвиг уровня, связанный с взаимодействием магнитных моментов электрона и ядра, равен

$$\delta \varepsilon_{\text{magn}} \sim \mu_B \mu_N \cdot K_{I\ell s} \cdot \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle. \quad (14.47)$$

Здесь $K_{I\ell s}$ — коэффициент, аналогичный $K_{j\ell s}$ в (14.23) и учитывающий действие операторов \hat{S} , \hat{L} , \hat{I} , а точнее — взаимодействие моментов ядра \vec{I} и электрона \vec{j} . Значение этого коэффициента зависит от полного момента атома F , который складывается теперь из I и j . В соответствии с правилом сложения моментов он может принимать одно из возможных значений

$$F \approx j + I, \quad j + I - 1, \dots, |j - I|. \quad (14.48)$$

Величина $\langle r^{-3} \rangle$ уже возникала в § 14.2. В частности, в задаче 14.4 мы получили её значение через r_0 (см. (14.29)). Объединяя коэффициенты $C_{n\ell}$ в (14.29) и $K_{I\ell s}$ в (14.47) в один, запишем

$$\delta \varepsilon_{\text{magn}} \sim \mu_B \cdot \mu_N \cdot K_{nF} \cdot \frac{Z^3}{r_0^3}.$$

Наконец, учитывая выражения для μ_B , μ_N , r_0 , можно окончательно записать

$$\delta \varepsilon_{\text{magn}} \sim \frac{m_e}{m_p} \cdot \alpha^2 \cdot Z^3 \cdot \varepsilon_0 \cdot K_{nF}. \quad (14.49)$$

Сравнивая этот результат с (14.23), (14.24), видим, что магнитное сверхтонкое расщепление меньше тонкого примерно в $m_e/m_p = 1/1836$ раз, т.е. слабее на три порядка.

Обратим внимание на одно важное обстоятельство: оценка (14.47) может быть получена на основе (14.34), т.е. из рассмотрения взаимодействия электрона с магнитным полем ядра. Точно такой же результат (естественно!) даёт оценка

взаимодействия ядра с полем движущегося электрона (см. задачу 14.8 и [2], § 121).

Задача 14.8. Оценить в приближении модели атома Бора энергию взаимодействия магнитного момента ядра с магнитным полем движущегося электрона.

Воспользовавшись известным выражением для магнитного поля в центре кругового витка с током, запишем

$$B(0) = \frac{2\pi I_e}{cr_n}.$$

Подставив сюда значение I_e (14.34) и учитывая, что

$$v = \frac{L}{mr_n}, \quad L_e \leq \ell \cdot \hbar,$$

найдем

$$\delta \varepsilon_{\text{magn}} = (\vec{\mu}_{\text{nucl}}, \vec{B}(0)) \sim \frac{\ell \cdot \mu_B \mu_N I}{r_n^3},$$

что совпадает по порядку величины с (14.47).

Перейдем теперь к рассмотрению эффекта конечности размеров ядра. Как и любая система зарядов, ядро может обладать собственным дипольным и квадрупольным моментами (а также моментами более высокого порядка, которые и описывают отличие электрического поля ядра от поля точечного заряда). Потенциал такого поля можно представить в виде ряда убывающих членов — потенциалов точечного заряда, электрических диполя, квадруполя, и т.д.:

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}) &= \varphi_0(\vec{r}) + \varphi_d(\vec{r}) + \varphi_{\text{quad}}(\vec{r}) + \dots, \\ \varphi_0(\vec{r}) &= \frac{Ze}{r}, \quad \varphi_d(\vec{r}) = \frac{(\vec{d}, \vec{r})}{r^3}, \\ \varphi_{\text{quad}} &= \frac{Q_{\alpha\beta}}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \cdot \left(\frac{1}{r} \right), \quad (14.50) \\ \vec{d} &= \int \rho(\vec{r}') \cdot \vec{r}' \cdot dV' - \text{дипольный момент}, \\ Q_{\alpha\beta} &= \int \rho(\vec{r}') \cdot x'_\alpha x'_\beta dV' - \text{компоненты квадрупольного момента}. \end{aligned}$$

Не будем мучить читателя анализом общих выражений, а ограничимся оценками на примерах. Простейший пример *точечного диполя* — два точечных заряда, +e и

$-e$, отстоящие на расстояние \vec{a} . Тогда поле такой системы (рис. 14.3) на расстояниях $r \gg a$ (отсюда и "точечность" диполя) описывается потенциалом

$$\Phi_d(r) = e \cdot \left(\frac{1}{r^{(+)}} - \frac{1}{r^{(-)}} \right) = e \cdot \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{a}|} - \frac{1}{r} \right) = e \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{\sum_{\alpha=1}^3 (r_{\alpha} - a_{\alpha})^2}} - \frac{1}{r} \right) \approx$$

$$\approx e \sum_{\alpha} \frac{r_{\alpha} a_{\alpha}}{r^3} = \frac{(\vec{d}, \vec{r})}{r^3}, \quad \vec{d} = e\vec{a}.$$

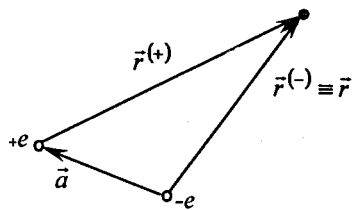


Рис. 14.3. К расчету потенциала "точечного" диполя

Вектор \vec{a} направлен от $-e$ к $+e$.

Пример простейшего квадруполь представляют два антипараллельных диполя (рис. 14.4). Потенциал его поля, очевидно, есть

$$\Phi_{\text{quad}} = \frac{(\vec{d}, \vec{r}_1)}{r_1^3} - \frac{(\vec{d}, \vec{r}_2)}{r_2^3}, \quad \vec{r}_1 = \vec{r}_2 + \vec{b} \equiv \vec{r} + \vec{b}.$$

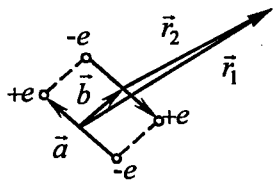


Рис. 14.4. Плоский квадруполь

Произведя аналогичное разложение, найдём выражение, которое в общем случае довольно громоздко:

$$\Phi_{\text{quad}} = \frac{(\vec{d}, \vec{r} + \vec{b})}{\left(\sum_{\alpha=1}^3 (\vec{r} + \vec{b})^2 \right)^{3/2}} - \frac{(\vec{d}, \vec{r})}{r^3} \approx \frac{\vec{d}, \vec{b}}{r^3} - 3 \frac{(\vec{d}, \vec{r}) \cdot (\vec{b}, \vec{r})}{r^5} =$$

$$= \frac{e}{r^3} \left((\vec{a}, \vec{b}) - 3 \frac{(\vec{a}, \vec{r})(\vec{b}, \vec{r})}{r^2} \right).$$

(14.51)

Отсюда, как, впрочем, и из (14.50), следует, что дипольный и квадрупольный потенциалы по порядку величины составляют

$$\Phi_d \sim \frac{e \cdot a}{r^2}, \quad \Phi_{\text{quad}} \sim \frac{e \cdot a^2}{r^3},$$

(14.52)

где a — характерный размер системы зарядов, в нашем случае — размер ядра.

Энергия взаимодействия электрона с полем ядра может быть, соответственно, представлена в виде ряда

$$\varepsilon = -e \cdot \Phi(\vec{r}) + \delta\varepsilon_{nc} + \delta\varepsilon_{\text{magn}} = \varepsilon_n + \delta\varepsilon_d + \delta\varepsilon_{\text{quad}} + \delta\varepsilon_{\text{magn}},$$

(14.53)

где ε_n — рассмотренная выше энергия уровней с учётом тонкого расщепления (14.23), (14.24). В соответствии с (14.11) имеем

$$\delta\varepsilon_d = -e \cdot \int (\psi_n^0)^* \cdot \frac{(\vec{d}, \vec{r})}{r^3} \cdot (\psi_n^0) \cdot d^3r,$$

(14.54)

$$\delta\varepsilon_{\text{quad}} \sim -e^2 a^2 \int (\psi_n^0)^* \cdot \frac{1}{r^3} (\psi_n^0) \cdot d^3r.$$

Дипольный член строго равен нулю. Это видно из приведённого выражения: записав $(\vec{d}, \vec{r}) = dr \cdot \cos\theta$, т.е. направив полярную ось вдоль вектора \vec{d} , разделим интеграл на радиальную и угловую части. Для угловой части интеграла имеем

$$\int |Y_{lm}(\theta)|^2 \cdot \cos\theta \cdot d\Omega = 0,$$

что прослеживается без труда на выражениях (10.31). Для квадрупольного сверхтонкого расщепления из (14.54) получим (с учётом (14.29))

$$\delta\varepsilon_{\text{quad}} \sim e^2 a^2 \cdot \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{e^2 a^2 Z^3}{r_0^3} \cdot C_{nl}.$$

(14.55)

За знаком $\delta\mathcal{E}_{\text{quad}}$ здесь и далее мы не будем следить, т.к. он зависит от конкретного распределения заряда в ядре. Это выражение удобно преобразовать, используя выражения (2.5) и (2.8):

$$r_0 \approx R_{\text{Bohr}} = \frac{r_e}{\alpha^2}, \quad \frac{e^2}{2r_0} \approx \varepsilon_0.$$

Тогда (14.55) можно записать в виде

$$\delta\mathcal{E}_{\text{quad}} \sim \left(\frac{a}{r_e}\right)^2 \cdot \alpha^4 \cdot Z^3 \cdot \varepsilon_0 \cdot 2C_{nl}. \quad (14.56)$$

Размер ядра (7.53) $a \sim 10^{-13} A^{1/3}$, где A – атомный вес, $r_e \approx 2,8 \cdot 10^{-13}$ см, поэтому $a/r_e \sim 1$ вплоть до $A \sim 20$, так что

$$\frac{\delta\mathcal{E}_{\text{magn}}}{\delta\mathcal{E}_{\text{quad}}} \sim \frac{m_e}{m_{\text{proton}}} \cdot \frac{1}{\alpha^2} \approx 10,$$

т.е. квадрупольное расщепление на порядок слабее магнитного и проявляется в атомах с нулевым спином и ненулевым квадрупольным моментом ядра.

Задача 14.9. Найти значение сверхтонкого расщепления основного $1^2S_{1/2}$ -состояния атома водорода. В атоме водорода имеет место только эффект магнитного сверхтонкого расщепления, т.к. его ядро – протон – не имеет квадрупольного электрического момента.

Воспользуемся строгим выражением для оператора возмущения (14.46). В состоянии $1S$ электрон не имеет орбитального момента ($\vec{L} = 0$). Поэтому оператор возмущения (14.46) имеет вид

$$\hat{V}_\mu(1S) = -4\pi \left(\hat{\mu}_e, \hat{\mu}_p \right) \cdot \delta(\vec{r}) + \frac{\left(\hat{\mu}_e, \hat{\mu}_p \right)}{r^3} - \frac{3 \left(\hat{\mu}_e, \vec{r} \right) \cdot \left(\hat{\mu}_p, \vec{r} \right)}{r^5}. \quad (14.57)$$

Здесь $\hat{\mu}_{\text{nuc}}$ (14.31) содержит оператор спина ядра \hat{I} . В нашем случае ядро – протон. Соответственно (см. § 11.3),

$$\hat{\mu}_{\text{nuc}} = \hat{\mu}_p = \mu_p \cdot \frac{\hat{I}}{I}.$$

И попробуем решить задачу "в лоб", вычислив величину $\delta\mathcal{E}_{\text{magn}}$ для оператора \hat{V}_μ (см. (14.11)).

Выражение для \hat{V}_μ (14.57) можно теперь переписать следующим образом:

$$\hat{V}_\mu = -\frac{\mu_e \cdot \mu_p}{\hbar I} \cdot \left[\left(\hat{S}, \hat{I} \right) \cdot 4\pi \delta(\vec{r}) + \sum_{k,\ell=1}^3 \hat{S}_k \hat{I}_\ell \left(-\frac{\delta_{k\ell}}{r^3} + 3 \frac{x_k x_\ell}{r^5} \right) \right]. \quad (14.58)$$

Энергию магнитного сверхтонкого расщепления найдём, используя значение ψ -функции $1^2S_{1/2}$ -состояния:

$$\Psi_{1s}(\vec{r}, s_k, I_k) = \psi_{1s}(\vec{r}) \cdot \chi(s_k) \cdot \chi(I_k),$$

где функция $\psi_{1s}(\vec{r})$ дана в (13.43), $\chi(s_k)$, $\chi(I_k)$ – спиноры, описывающие спиновое состояние электрона и ядра соответственно. Тогда в выражении для $\delta\mathcal{E}_{\text{magn}}$ (14.11) можно разделить пространственную и спиновую части. Пространственная часть содержит три интеграла по объёму атома ($0 \leq r \leq \infty$). Первый из них есть (см. (13.43))

$$\text{Int1} = 4\pi \int \delta(\vec{r}) \cdot |\psi_{1s}(\vec{r})|^2 d^3r = 4\pi |\psi_{1s}(0)|^2 = \frac{4}{r_0^3}.$$

Второй интеграл

$$(\text{Int2})_{k\ell} = -\delta_{k\ell} \int \frac{1}{r^3} \cdot |\psi_{1s}(\vec{r})|^2 d^3r = -\frac{4\delta_{k\ell}}{r_0^3} \int_0^\infty \frac{e^{-2r/r_0}}{r} \cdot dr$$

логарифмически расходится на нижнем пределе. Но эта особенность "гасится" третьим интегралом. Действительно, этот тройной интеграл

$$(\text{Int3})_{k\ell} = 3 \int \frac{x_k x_\ell}{r^5} \cdot |\psi_{1s}(\vec{r})|^2 \cdot d^3r = \frac{3}{\pi r_0^3} \iiint \frac{x_k x_\ell}{r^5} \cdot e^{-2r/r_0} \cdot dx_1 dx_2 dx_3, \quad k, \ell = 1, 2, 3,$$

при $k \neq \ell$ содержит произведение двух интегралов (в бесконечных пределах), каждый из которых есть интеграл от несимметричной функции в симметричных пределах, что, как известно, равняется нулю. Поэтому ненулевые значения Int3 имеет только при $k = \ell$:

$$(\text{Int3})_{kk} = \frac{\delta_{kk} \cdot 3}{\pi r_0^3} \iiint \frac{x_k^2}{r^5} \cdot e^{-2r/r_0} \cdot dx_1 \cdot dx_2 \cdot dx_3.$$

В этом выражении подынтегральная функция имеет один и тот же вид при любых k , а координаты x_k равноправны, т.е. $3x_k^2 = r^2$. Соответственно,

$$(\text{Int3})_{kk} = \frac{\delta_{kk}}{\pi r_0^3} \int \frac{1}{r^3} \cdot e^{-2r/r_0} \cdot d^3r = \frac{4\delta_{kk}}{r_0^3} \int \frac{e^{-2r/r_0}}{r} \cdot dr = -(\text{Int2})_{kk},$$

что ликвидирует расходимость. Однако сумма интегралов 2 и 3 "не вполне" равна нулю, т.к. по существу это разность двух величин, стремящихся к бесконечности при стремлении к нулю нижнего предела интеграла, т.е. неопределённость, раскрыть которую ещё нужно суметь. Сделать это при выбранном способе вычисления едва ли возможно. Тем не менее результаты решения "в лоб" можно использовать для обоснования "непрямого" решения, которое и приведём, используя приём, применённый для решения этой задачи в [8] (задача 11.4). При этом постараемся избежать применённых там математических операций, которые могут вызвать затруднение у читателя, не слишком искушённого в специальных приёмах теоретической физики.

Используем вначале результат, полученный при решении "в лоб": ненулевой вклад в значение $\text{Int}3$ дают слагаемые x_k, x_l только при $k = l$. На этом основании можно утверждать, что в (14.58) можно отбросить слагаемые с $k \neq l$ и записать выражение в квадратных скобках в виде

$$\left[\left(\hat{S}, \hat{I} \right) \cdot 4\pi\delta(\vec{r}) + \sum_{k,l=1}^3 \hat{S}_l \hat{I}_k \left(-\frac{\delta_{kl}}{r^3} + 3\frac{x_l x_k}{r^5} \right) \right] = \sum_{k=1}^3 \hat{S}_k \hat{I}_k \left(4\pi\delta(\vec{r}) - \frac{1}{r^3} + 3\frac{x_k^2}{r^5} \right).$$

Затем вернёмся обратно от δ -функции к лапласиану (см. вывод (14.36)) и используем равенство

$$\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \left(\frac{1}{r} \right) = -\frac{1}{r^3} + 3\frac{x_k^2}{r^5}.$$

Всё вместе это даёт

$$\left[\left(\hat{S}, \hat{I} \right) \cdot 4\pi\delta(\vec{r}) + \sum_{k,l=1}^3 \hat{S}_l \hat{I}_k \left(-\frac{\delta_{kl}}{r^3} + 3\frac{x_l x_k}{r^5} \right) \right] = \sum_{k=1}^3 \hat{S}_k \hat{I}_k \left(-\Delta + \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \right) \cdot \frac{1}{r},$$

и оператор (14.58) можно записать теперь как

$$\hat{V}_\mu = -\frac{\mu_e \mu_p}{\hbar I} \cdot \sum_{k=1}^3 \hat{S}_k \hat{I}_k \cdot \left(-\Delta + \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \right) \cdot \frac{1}{r}. \quad (14.59)$$

Второе утверждение, полученное в решении "в лоб", – равноправность координат x_1, x_2, x_3 . Они же совершенно симметрично входят в функцию $r(x_k)$, подлежащую дифференцированию в последнем выражении. Всё это позволяет сделать вывод, что

$$\iint |\Psi_{1s}(\vec{r})|^2 \left(\Delta - \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \right) \cdot \frac{1}{r} d^3r = C, \quad k = 1, 2, 3,$$

где C – константа, одна и та же для любого из индексов k . Записав три эти равенства для каждого из k и сложив их, найдём

$$\iint |\Psi_{1s}(\vec{r})|^2 \left(3\Delta - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \right) \cdot \frac{1}{r} d^3r = 3C.$$

Поскольку $3\Delta - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} = 2\Delta$ и $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(\vec{r})$, получим (см. (13.43))

$$C = -\frac{8\pi}{3} \cdot |\Psi_{1s}(0)|^2 = -\frac{8}{3r_0^3}.$$

Используя этот результат, найдём для оператора (14.59)

$$\delta\mathcal{E}_{\text{magн}} = \langle \vec{r}, s, I | \hat{V}_\mu | \vec{r}, s, I \rangle = \frac{\mu_e \mu_p}{\hbar I r_0^3} \cdot \langle s, I | \left(\hat{S}, \hat{I} \right) | s, I \rangle \cdot \left(-\frac{8}{3} \right). \quad (14.60)$$

Спиновую часть значения $\delta\mathcal{E}_{\text{magн}}$ вычислим, воспользовавшись равенством (сравни (14.20)):

$$2 \left(\hat{S}, \hbar \hat{I} \right) = \left(\hat{S} + \hbar \hat{I} \right)^2 - \left| \hat{S} \right|^2 - \hbar^2 \cdot \left| \hat{I} \right|^2.$$

Поскольку $\hat{S}^2 \chi_s = \hbar^2 s(s+1) \cdot \chi_s$, $\left| \hat{S} \right|^2 \chi_s = \hbar^2 s(s+1) \cdot \chi_s$, $\left| \hat{I} \right|^2 \chi_p = I(I+1) \cdot \chi_p$, $I \pm s = F$, $I = s = \frac{1}{2}$,

найдем, учтя ортонормированность спиновой части ψ -функции,

$$\left\langle \left(\hat{S}, \hat{I} \right) \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot [F(F+1) - s(s+1) - I(I+1)] = \frac{\hbar}{4} \cdot \begin{cases} 1, & F=1, \\ -3, & F=0. \end{cases}$$

Подставив этот результат в (14.60) и учитывая, что $\mu_e = -|\mu_e|$, получим значения сдвигов уровней сверхтонкой структуры

$$\delta\mathcal{E}_{\text{magн}} = \frac{8}{3} \cdot \frac{|\mu_e| \cdot \mu_p}{r_0^3} \cdot \begin{cases} 1, & F=1, \\ -3, & F=0. \end{cases} \quad (14.61)$$

Численное значение $\delta\mathcal{E}_{\text{magн}}$ проще всего найти, вычислив в гауссовых единицах $|\mu_e|/r_0^3$ и умножив на величину μ_p в эВ/Гс (см. § 11.3). Найдём

$$\frac{|\mu_e|}{r_0^3} \approx 62,72 \text{ кГс},$$

$$\delta\mathcal{E}_{\text{magн}} \approx 1,47 \text{ мкэВ} \cdot \begin{cases} 1, & F=1, \\ -3, & F=0, \end{cases}$$

что совпадает с $\delta\mathcal{E}_1$ (§ 14.5) и структурой уровней $1^2S_{1/2}$ (рис. 14.5).

§ 14.4. Лэмбовский сдвиг

Ещё один эффект, формирующий сверхтонкую структуру уровней энергии атома, был обнаружен экспериментально в спектроскопии атомов водорода во второй половине 30-х гг. и точно измерен лишь в 1947 г. (*W.E. Lamb, R. Retherford*) методом радиоспектроскопии (гл. 19). Существо этого эффекта состоит в том, что уровни с $\ell = 0$ (S -уровни) имеют несколько большую энергию, чем уровни с $\ell \geq 1$. Объяснение природы такого "лэмбовского сдвига" было дано в квантовой электродинамике Х. Бёте (*H. Bethe*). Дело в том, что *физический вакуум* не есть непонятная "пустота", а некое "море" из виртуальных пар частиц и античастиц, самые легкие из которых – электрон и позитрон. Эти пары возникают на время, удовлетворяющее соотношению неопределённостей (5.4). Для пары электрон-позитрон это время порядка

$$\Delta t < \frac{\hbar}{2m_e c^2} \sim 10^{-21} \text{ с},$$

в результате закон сохранения энергии не нарушается, и энергия (масса частиц) не возникает "ниоткуда". Этот фон частиц-античастиц носит случайный характер, так что плотность его флуктуирует, что сказывается на характере электромагнитного поля, а в атоме – на характере электростатического поля ядра. Флуктуации поля вызывают "дрожание" электрона и, соответственно, некоторое увеличение энергии уровня. Эффект тем больше, чем ближе электрон находится к ядру. Поэтому он значителен в S -состояниях и мал в состояниях с $\ell \geq 1$ (см. рис. 14.5).

Теоретическое значение лэмбовского сдвига дают расчеты так называемых *радиационных поправок*, вычисляемых в квантовой теории поля (квантовой электродинамике) с помощью техники "диаграмм Фейнмана". Для S -состояния уровня n лэмбовский сдвиг составляет

$$\delta \epsilon_{no} \approx \frac{4mc^2}{3\pi n^3} \cdot \alpha(Z\alpha)^4 \cdot \ln \frac{1}{Z\alpha} \approx 4,48 \cdot 10^{-6} \frac{Z^4}{n^3} (4,92 - \ln Z) \text{ эВ}. \quad (14.62)$$

Для атома водорода, и особенно для его нижних уровней, а также для водородоподобных атомов лэмбовский сдвиг рассчитывается с очень высокой точностью, поэтому его прецизионное измерение позволяет проводить сравнение теории и эксперимента с учетом вклада всё более и более слабых эффектов, таких, например, как "поляризация вакуума" – экранировка поля ядра виртуальными парами, включая пары более тяжелых частиц (мюон-антимюон и др.). Экспериментальное значение лэмбовского сдвига $2S$ -уровня атома водорода составляет сегодня примерно $4,37 \cdot 10^{-6}$ эВ и измерено с точностью $\pm 10^{-11}$ эВ. Для водородоподобных атомов лэмбовский сдвиг возрастает (табл. 14.1). Развитие техники ускорителей заряженных частиц привело к созданию накопителей заряженных частиц с электронным охлаждением, получивших название "кулеров" (от англ. *cooler* – охладитель). В них пучки ионов могут циркулировать длительное время, до часа, имея очень малый разброс по скорости, вплоть до $\Delta v/v \sim 1 \cdot 10^{-6}$. Это позволило на "кулере" в Исследовательском центре тяжёлых

ионов (Дармштадт, Германия) провести уникальные эксперименты в ядерной и атомной физике. Среди них – измерение лэмбовского сдвига в водородоподобном ионе U^{91+} : 470 ± 16 эВ (теоретическое значение $463,4 \pm 1$ эВ).

Таблица 14.1. Лэмбовский сдвиг уровня $n=2$ в водороде и водородоподобных атомах и ионах

Атом (ион)	Лэмбовский сдвиг уровня $n=2$		
	Частота, ГГц	Энергия, мкэВ	Точность измерения
H	1,057 8514 (19)	4,37	$1,8 \cdot 10^{-6}$
D	1,059 282 (64)	4,4	$6 \cdot 10^{-5}$
He ⁺	14,046 2 (12)	58,3	$7 \cdot 10^{-5}$
Li ²⁺	62,765 (21)	260,7	$3,5 \cdot 10^{-4}$
O ⁷⁺	$2,215 6 (75) \cdot 10^3$	9200,2	$3,4 \cdot 10^{-4}$
Cl ¹⁶⁺	$31,19 (22) \cdot 10^3$	130371,0	$7 \cdot 10^{-3}$
Ar ¹⁷⁺	$38,0 (6) \cdot 10^3$	157824,0	$1,6 \cdot 10^{-2}$
U ⁹¹⁺	рентген	470 эВ	$3,4 \cdot 10^{-2}$

§ 14.5. Структура нижних уровней атома водорода

Тонкое и сверхтонкое расщепление уровней приводят к снятию их вырождения (13.37). О важности атома водорода как квантово-механической модели говорилось выше не раз. Поэтому полезно привести структуру двух его нижних уровней, иллюстрирующую всё сказанное в §§ 14.2–14.4 (рис. 14.5). Поясним обозначения на рисунке. Символы уровней имеют вид

$$n^{2s+1}L_j,$$

где $s=1/2$ – спиновое квантовое число, L – символ числа ℓ (буквы S, P, \dots , см. (13.38)), j – полный момент электрона (11.4), F – полный момент атома (14.48). Так, например, в состоянии с $n=2, \ell=1$ имеем $j=1/2$ и $3/2, 2s+1=2$, так что это состояние обозначают $2^2P_{1/2}$ и $2^2P_{3/2}$. Спин ядра водорода (протона)

$I=1/2$. Поэтому в состоянии $j=1/2$ существуют два подуровня сверхтонкого расщепления: $F=0$ и 1. В состоянии $j=3/2$, соответственно, возможны "подсостояния" $F=1$ и 2. Разности частот, показанные на рис. 14.5, связаны с соответствующими значениями сдвигов энергии известной нам формулой (см. (4.1))

$$\delta\varepsilon = 2\pi\hbar \cdot \Delta\nu.$$

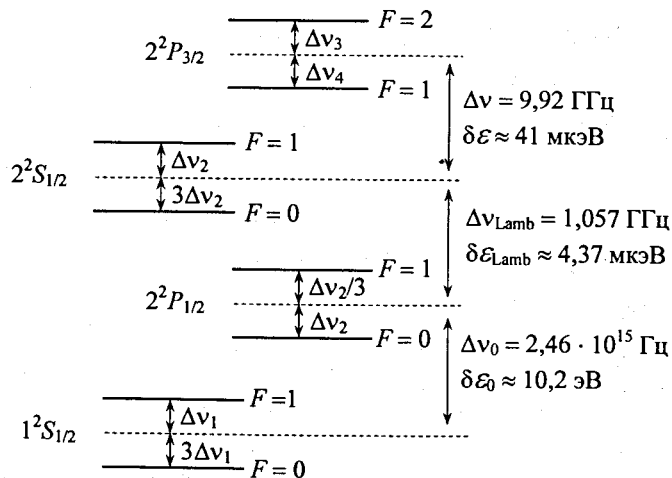


Рис. 14.5. Структура уровней $n=1, 2$ атома водорода.

$$\Delta\nu_1 = 355,1014 \text{ МГц}, \Delta\nu_2 = \Delta\nu_1/8, \Delta\nu_3 = \Delta\nu_2/10, \Delta\nu_4 = (13/30)\Delta\nu_2, \Delta\nu_{\text{Lamb}} = 1,0578514(19) \text{ ГГц}$$

Пунктиром показаны значения энергии уровней без учёта сверхтонкого расщепления (тонкая структура). Сдвиг уровня $2^2P_{3/2}$, равный $\delta\varepsilon \approx 41$ мкэВ, вызван спин-орбитальным взаимодействием (14.23), (14.25), $\delta\varepsilon_0$ — разность энергий первого и второго уровней основной структуры (13.33). Сверхтонкая структура первого и второго уровней характеризуется следующими параметрами:

$$\Delta\nu_1 = 355,1014 \text{ МГц},$$

$$\delta\varepsilon_1 \approx 1,47 \text{ мкэВ},$$

$$\Delta\nu_2 = \frac{\Delta\nu_1}{8} = 44,3876 \text{ МГц},$$

$$\delta\varepsilon_2 \approx 0,18 \text{ мкэВ},$$

$$\Delta\nu_3 = \frac{\Delta\nu_2}{10} = 35,5101 \text{ МГц},$$

$$\delta\varepsilon_3 \approx 0,15 \text{ мкэВ},$$

$$\Delta\nu_4 = (13/30)\Delta\nu_2,$$

$$\Delta\nu_{\text{Lamb}} = 1,057 \text{ ГГц},$$

$$\delta\varepsilon_{\text{Lamb}} \approx 4,37 \text{ мкэВ}.$$

Два последних дают величину лэмбовского сдвига уровня $2S_{1/2}$ относительно уровня $2P_{1/2}$. Подчеркнём, что согласно (14.25) эти уровни без учёта лэмбовского сдвига имели бы одинаковую энергию, т.к. $j=1/2$ у того и другого.

Обратим также внимание на то, что частоты $\Delta\nu_1$ лежат в радиодиапазоне, что позволяет использовать прецизионные методы радиоспектроскопии (§ 19.2) для измерения разности энергий уровней. Разности энергий подуровней сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода соответствуют частота и длина волны

$$4 \cdot \Delta\nu_1 = 1,4204 \text{ ГГц}, \quad \lambda = 21,1 \text{ см}.$$

Регистрация излучения галактик на этой длине волны широко используется в радиоспектроскопии для изучения строения Вселенной.

Задача 14.10. На основе анализа спиновых состояний $1S$ -уровней сверхтонкой структуры атома водорода получить значения матричных элементов оператора \hat{V}_μ (14.58) для этих уровней.

Указание: воспользоваться результатами задачи 14.9.

Для вычисления матричных элементов $1S$ -уровней не требуется производить прямые вычисления, если известны значения сверхтонкого расщепления (14.61). Можно поступить проще, учитывая свойство ортонормированности спиновой части ψ -функции

$$\Psi(\vec{r}, \vec{s}, \vec{l}) = \psi(\vec{r}) \cdot \chi_e(\vec{s}) \cdot \chi_p(\vec{l}).$$

Сверхтонкая структура $1S$ -уровня содержит четыре состояния, три из которых, соответствующие $F=1$, вырождены. Каждое из четырёх состояний характеризуется определённым набором квантовых чисел, представленным в табл. 14.2. Два её первых столбца показывают направление

z-проекции спинов электрона и протона. Подчеркнём, что в данном случае выбор выделенного направления (ось z) определяется "волей" экспериментатора. Последний столбец содержит

Таблица 14.2. Сверхтонкая структура 1S атома водорода

Состояние	Направление спина		F	m _F	Спиновая функция
	\vec{S}_e	\vec{I}_p			
$1^2S_{1/2} (F=1)$	↑	↑	1	1	++⟩
	↓(↑)	↑(↓)	1	0	$\frac{ +-\rangle + -+\rangle}{\sqrt{2}}$
	↓	↓	1	-1	--⟩
$1^2S_{1/2} (F=0)$	↑(↓)	↓(↑)	0	0	$\frac{ +-\rangle - -+\rangle}{\sqrt{2}}$

обозначение спиновой части ψ-функции – произведений $\chi_e(\vec{S}) \cdot \chi_p(\vec{I})$. Содержание этого столбца анализируется в следующей задаче. Там же выясняется смысл стрелок в третьем и четвёртом столбцах таблицы. Сейчас же нам достаточно заметить, что в матрице V_{pq} (14.13) отличны от нуля по крайней мере диагональные элементы

$$V_{pp} = \langle X_{np} | \hat{V}_\mu | X_{np} \rangle \neq 0, \quad p = 1, 2, 3, 4,$$

т.к. они содержат $|\chi_e|^2 \cdot |\chi_p|^2 = 1$. На этом же основании можно предположить, что элементы $V_{11} = V_{33} \equiv A$, $V_{22} = V_{44} \equiv B$. Кроме того, "можно заподозрить", что ненулевое значение имеют элементы, содержащие $\chi_e \cdot \chi_p$ при $m = 0$, т.е. состояния 2 и 4 из табл. 14.2:

$$V_{24} = V_{42} \equiv C.$$

Сделав эти предположения, запишем секулярное уравнение (14.14)

$$\begin{vmatrix} A - \delta\varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B - \delta\varepsilon & 0 & C \\ 0 & 0 & A - \delta\varepsilon & 0 \\ 0 & C & 0 & B - \delta\varepsilon \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая определитель, приходим к алгебраическому уравнению для $\delta\varepsilon$

$$(A - \delta\varepsilon)^2 \cdot (B - \delta\varepsilon)^2 - C^2 = 0.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_{1,3} &= A, \\ \delta\varepsilon_{2,4} &= B \pm C. \end{aligned}$$

Нумерация корней, вообще говоря, произвольна, но здесь она выбрана с определённым смыслом, который становится ясен в задаче 18.1.

Потребовав, чтобы один из корней $\delta\varepsilon_{2,4}$ совпадал с $\delta\varepsilon_{1,3}$, а второй был равен $-3 \cdot \delta\varepsilon_{1,3}$ (см. (14.61)), запишем

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_1 = \delta\varepsilon_3 &= A \equiv \frac{8}{3} \cdot \frac{|\mu_e| \cdot \mu_p}{r_0^3}, \\ B + C &= A, \\ B - C &= -3A, \end{aligned}$$

отсюда

$$B = -A, \quad C = 2A.$$

Заметим, что выбрав

$$B + C = -3A,$$

$$B - C = A,$$

получим $B = -A$, $C = -2A$. Поскольку $C = V_{24} = V_{42}$ – недиагональный элемент, его знак не сказывается на значении энергии уровней 2 и 4 – мы, как легко видеть, просто меняем их местами или, иными словами, меняем нумерацию уровней.

Окончательно матрица V_{pq} имеет вид

$$\|V_{pq}\| = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A & 0 & 2A \\ 0 & 0 & A & 0 \\ 0 & 2A & 0 & -A \end{pmatrix}. \quad (14.63)$$

Задача 14.11. Вычислить значения m_F и S_z в состояниях 2 и 4 из табл. 14.2.

Записав спиновую часть ψ-функции в состоянии 2 в виде

$$\chi_2(S_z, I_z) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_e(+s) \cdot \chi_p(-I) + \chi_e(-s) \cdot \chi_p(I)),$$

найдем (см. (8.16))

$$\hat{h}m_F^{(2)} \chi_2(S_z, I_z) = \hat{F}_z \chi_2(S_z, I_z) = (\hat{S}_z + \hat{I}_z) \chi_2(S_z, I_z).$$

Поскольку $\hat{S}_z \chi_e(\pm s) = \pm \hbar s \chi_e(\pm s)$ и $\hat{I}_z \chi_p(\pm I) = \pm \hbar I \chi_p(\pm I)$, то

$$\hat{h}m_F^{(2)}(S_z, I_z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \hbar s \cdot \chi_e(+s) \cdot \chi_p(-I) - \hbar s \cdot \chi_e(-s) \cdot \chi_p(I) - \hbar I \cdot \chi_e(+s) \cdot \chi_p(-I) + \hbar I \cdot \chi_e(-s) \cdot \chi_p(I) \}.$$

Учитывая, что $S = I = 1/2$, получим $m_F^{(2)} = 0$. Аналогично находим $m_F^{(4)} = 0$.

Вычисление значения $S_z^{(2)}$ несколько сложнее, поскольку $\chi_2(S_z, I_z)$ не является собственной функцией оператора \hat{S}_z . Поэтому воспользуемся равенством (8.23) и не забудем, что $s = 1/2$. Находим

$$S_z^{(2)} = \chi_2^* \hat{S}_z \chi_2 = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \cdot [\chi_e^*(s) \cdot \chi_p^*(-l) + \chi_e^*(-s) \cdot \chi_p^*(l)] \cdot [\chi_e(s) \cdot \chi_p(-l) - \chi_e(-s) \cdot \chi_p(l)] = \\ = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} (1 - 0 + 0 - 1) = 0.$$

Такой же нулевой результат, как легко видеть (достаточно поменять знаки перед $\chi_e^*(-s)$ и $\chi_e(-s)$), получается и для $S_z^{(4)}$. Казалось бы, это означает, что спин электрона в состояниях 2 и 4 направлен поперёк (!) выделенного направления. Но это невозможно, т.к. мы знаем, что (§ 10.5) проекция момента импульса может изменять своё значение только на целое число \hbar . Что же такое состояние 2? "Устройство" состояния 4 вполне понятно – в этом состоянии проекции спинов электрона и протона направлены навстречу выделенному (нами!) направлению, причём $S_z^{(4)} < 0$. Вот и приходим к выводу, что 2 и 4 – "хитрые" квантовые состояния – они являются комбинацией двух простых состояний, что видно и из структуры спиновой части их волновых функций. В каждом из этих состояний значение S_z в среднем равно нулю, а спин электрона в среднем половину времени направлен вдоль оси z , а половину времени – против (у протона – наоборот). Вот такие "квантовые чудеса"! Они, эти "чудеса", встретятся и дальше, в эффекте Зеемана (см. задачи 18.2, 18.3). В результате приходим к выводу, что атом водорода в состояниях $1^2S_{1/2}$ ($F = 1$) ведёт себя как частица со спином 1.

Между состояниями 2 и 4 возможна интерференция, подобная описанной в § 16.2 ниже.

§ 14.6. Структура уровней позитрония*

Позитроний (Ps) может находиться в двух состояниях – ортопозитроний (o-Ps), в котором спины электрона и позитрона параллельны ($j = 1$) и парапозитроний (p-Ps), в котором спины антипараллельны. И в этом отношении он является аналогом атома водорода ($F = 1, 0$). Соответственно, ортосостояние обозначают также символом n^3L_1 , парасостояние – символом n^1L_0 (см. § 14.5).

Время жизни орто- и парапозитрония в основном $1S$ -состоянии различается на три порядка:

o-Ps, 1^3S_1 -состояние – 142,037 нс ($\pm 2,5 \cdot 10^{-4}$),

p-Ps, 1^3S_0 -состояние – 125,142 пс ($\pm 2 \cdot 10^{-4}$).

Энергия состояний позитрония без учёта тонкого и сверхтонкого расщепления находится достаточно просто, подстановкой в (13.33) значения $m_z = m_e$ (см. задачу 13.8), или $m_0 = m_e/2$, что даёт

$$\varepsilon_n = -\frac{\varepsilon_0}{2n^2} \approx -\frac{6,8}{n^2} \text{ эВ}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (14.64)$$

Вычисление поправок тонкого и сверхтонкого расщепления не удастся сделать простой заменой приведённой массы на $m_e/2$. Например, релятивистская поправка с $\left(\frac{\hat{p}}{m}\right)^4$ в (14.24) при такой замене имеет вчетверо большее значение, чем при прямом вычислении. Действительно, импульсы электрона \vec{p}_- и \vec{p}_+ в системе их центра масс (система позитрония) равны по величине и противоположны по направлению (см. (13.5)):

$$\vec{p}_- \equiv m_e \dot{\vec{r}}_e = \frac{m_e}{2} \cdot \dot{\vec{r}} = -\vec{p}_2 \equiv -\vec{p}_+ \equiv \vec{p},$$

где \vec{p} – импульс частицы с приведённой массой $m_0 = m_e/2$. Аналогично тому, как это сделано в § 14.2 при выводе релятивистской поправки, запишем суммарную кинетическую энергию электрона и позитрона

$$\varepsilon_{\text{kin}} = \sqrt{p_+^2 c^2 + m_e^2 c^4} + \sqrt{p_-^2 c^2 + m_e^2 c^4} - 2m_e c^2 \approx \frac{p^2}{m} - \frac{p^4}{4m_e^3 c^2}.$$

Соответственно, в операторе возмущения (14.24) для позитрония первое слагаемое имеет значение

$$\hat{V}_{nj}^{(1)} = -\frac{\left(\frac{\hat{p}}{m}\right)^4}{4m_e^3 c^2}.$$

Следующая особенность позитрония – его магнитный момент. Орбитальный магнитный момент позитрония μ_L (§ 14.3) равен нулю, т.к. заряды электрона и позитрона равны по величине и противоположны по знаку, а механические моменты равны (в приближении "атома Бора" обе частицы

вращаются с одинаковыми скоростями вокруг общего центра масс, задача 13.8).

Поэтому оператор орбитального момента атома позитрония равен

$$\hat{L} = \hat{L}_{\text{pos}} + \hat{L}_e = 2\hat{L}_e,$$

в то время как оператор орбитального магнитного момента

$$\hat{\mu}_l = \frac{e}{2m_e c} \cdot (\hat{L}_{\text{pos}} - \hat{L}_e) = 0.$$

Собственные магнитные моменты электрона (11.24) и позитрона также равны по абсолютной величине и противоположны по знаку:

$$\mu_{\text{pos}} = -\mu_e = \mu_B.$$

Поэтому *спиновый магнитный момент позитрония* (и его оператор) пропорциональны разности векторов спинов электрона и позитрона (и их операторов)

$$\bar{\mu}_{\text{Ps}} = \hat{\mu}_{\text{pos}} + \hat{\mu}_e \approx 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot (\bar{S}_{\text{Ps}} - \bar{S}_e).$$

В ортосостоянии, где спины обеих частиц параллельны, $\bar{S}_{\text{pos}} = \bar{S}_e$, а магнитные моменты антипараллельны, имеем

$$\bar{S}_{\text{o-Ps}} = 2\bar{S}_{\text{Ps}}, \quad \mu_{\text{o-Ps}} \equiv 0.$$

В парасостоянии $\bar{S}_{\text{pos}} = -\bar{S}_e$, поэтому

$$\bar{S}_{\text{p-Ps}} = 0, \quad |\bar{\mu}_{\text{p-Ps}}| \approx 2\mu_B.$$

Такую особенность также следует учитывать, записывая выражения для операторов тонкого и сверхтонкого расщепления.

Здесь следует отметить, что несмотря на равенство нулю магнитного момента o-Ps, в сильных магнитных полях для него имеет место эффект Зеемана (см. § 18.1 и задача 18.3).

Всё сказанное подтверждает оценка значения сверхтонкого расщепления основного состояния позитрония на основе оператора (14.46). Напомним, что в основном, 1S, состоянии $\ell = 0$, поэтому тонкое расщепление отсутствует.

Воспользовавшись результатом задачи 14.9 и заменив

$$\mu_{\text{nucl}} \rightarrow \mu_+ \approx \mu_B, \quad |\mu_e| \approx \mu_B, \quad r_0 \rightarrow 2R_{\text{Bohr}},$$

из (14.61) найдём

$$\delta\epsilon_{\text{Ps}}|_{1S} = \frac{1}{3} \cdot \frac{\mu_B^2}{R_{\text{Bohr}}^3} \cdot \begin{cases} 1, & F=1 \text{ (o-Ps)}, \\ -3, & F=0 \text{ (p-Ps)}. \end{cases}$$

Отсюда следует, что в основном состоянии уровень o-Ps расположен выше уровня p-Ps на

$$\delta\epsilon_{\text{Ps}}|_{1S} = \frac{4}{3} \cdot \frac{\mu_B^2}{R_{\text{Bohr}}^3} = \frac{2}{3} \cdot \alpha^2 \epsilon_0.$$

В то же время, строгий квантовый расчёт (см. [5], § 84 и задача 2 там) даёт

$$\delta\epsilon_{\text{Ps}}|_{1S} = \frac{7}{6} \cdot \alpha^2 \epsilon_0 \approx 8,2 \cdot 10^{-4} \text{ эВ}.$$

Отметим, что этот результат получен без учёта *радиационных поправок* (§ 14.4).

Их расчёт приводит к ощутимому изменению:

$$\delta\epsilon_{\text{Ps}}|_{1S} = 8,41064 \cdot 10^{-4} \text{ эВ}. \quad (14.65)$$

Аналогично тому, как это сделано для 1S-состояния атома водорода (табл. 14.2), удобно представить и параметры основного состояния позитрония (табл. 14.3). Знаками "+" и "-" в последнем столбце обозначены направления спинов позитрона и электрона в атоме позитрония, т.е. функции χ_{pos} и χ_e , причём первой стоит функция позитрона. Так, $|++\rangle$ означает $(\chi_{\text{pos}} \uparrow) \cdot (\chi_e \uparrow)$, а $|+-\rangle$, соответственно, $(\chi_{\text{pos}} \uparrow) \cdot (\chi_e \downarrow)$.

Таблица 14.3. Параметры основного состояния позитрония

Состояние	\bar{S}_e	\bar{S}_{pos}	F	m_F	μ_{atom}	Спиновая функция
1^3S_1 (o-Ps)	\uparrow	\uparrow	1	1	0	$ ++\rangle$
	$\downarrow(\uparrow)$	$\uparrow(\downarrow)$	1	0	0	$\frac{ +-\rangle + -+\rangle}{\sqrt{2}}$
	\downarrow	\downarrow	1	-1	0	$ --\rangle$
1^1S_0 (p-Ps)	$\uparrow(\downarrow)$	$\downarrow(\uparrow)$	1	0	$2\mu_B$	$\frac{ +-\rangle - -+\rangle}{\sqrt{2}}$

ГЛАВА 15. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

§ 15.1. Одночастичное приближение, эффективное поле.

Сложные атомы

В атомах, содержащих в электронной оболочке более одного электрона, следует учитывать не только взаимодействие электронов с ядром, но и между собой. Для этого нужно, вообще говоря, записать потенциал всей системы зарядов, входящих в атом, и рассмотреть движение каждого электрона в этом поле, т.е., на языке квантовой механики, решить уравнение Шрёдингера для всех частиц, участвующих во взаимодействии. Такое уравнение (в стационарном случае) имеет вид, аналогичный (7.13), но содержащий сумму по всем Z электронам. В трёхмерном случае имеем

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^Z \Delta_i \psi + \left\{ \sum_{i=1}^Z \left(-\frac{Ze^2}{r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|} + V_{\text{magn}} \right\} \cdot \psi = \varepsilon \psi. \quad (15.1)$$

Здесь i, k – номер электрона, r_i, r_k – расстояние от центра ядра до электрона, Z – атомный номер и, одновременно, полное число электронов в нейтральном (неионизованном) атоме, V_{magn} – член, учитывающий спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействия. Волновая функция является в этом случае функцией координат всех электронов:

$$\psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z). \quad (15.2)$$

Конечно, задача в таком виде выглядит достаточно безнадежно, да к тому же уравнение (15.1) не учитывает движение ядра, т.е. в нём масса ядра принята бесконечной (сравни § 13.1). Достаточно хорошим и, что немаловажно, доступным для аналитических и численных методов расчёта, является так называемое *одночастичное приближение*, дающее результаты, неплохо согласующиеся с экспериментальными данными. Суть этого приближения в том, что каждый из атомарных электронов считается независимым и движущимся в некотором эффективном поле ядра и остальных электронов. Тогда волновая

функция атома есть произведение волновых функций электронов (в соответствии с определением вероятности одновременности N независимых событий):

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z, s_1, s_2, \dots, s_Z) = \psi_1(\vec{r}_1, s_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2, s_2) \cdots \psi_Z(\vec{r}_Z, s_Z), \quad (15.2)$$

s_i – спиновая координата i -го электрона. Тогда для каждого из электронов можно записать своё уравнение Шрёдингера с эффективной потенциальной энергией $U_{\text{eff}}(\vec{r}_i)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi_i(\vec{r}_i, s_i) + U_{\text{eff}}(\vec{r}_i, s_i) \cdot \psi_i(\vec{r}_i, s_i) = \varepsilon_i(\vec{r}_i, s_i) \cdot \psi_i(\vec{r}_i, s_i). \quad (15.3)$$

Потенциальная энергия $U_{\text{eff}}(\vec{r}_i)$ включает взаимодействие i -го электрона с ядром и остальными электронами. Успех дальнейшего продвижения существенно зависит от оптимальности выбора способа описания $U_{\text{eff}}(\vec{r}_i, s_i)$. Простейший случай – рассмотренные в § 13.4 водородоподобные атомы и ионы. Более сложная задача – расчёт атомов в средних столбцах таблицы Менделеева, для которых требуется учёт взаимодействия "близлежащих" электронов между собой, из-за чего поле перестаёт быть центральным.

Один из примеров, поддающихся расчёту, гелий и гелиеподобные атомы ($\text{Li}^+, \text{Be}^{2+}, \dots$), в которых

$$U_{\text{eff}} = -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (15.4)$$

где Ze – заряд ядра или "внутренней" части атома, r_1 и r_2 – расстояния 1-го и 2-го электронов от ядра, r_{12} – расстояние между ними. В этих атомах энергия межэлектронного взаимодействия существенна. Так, энергия ионизации иона He^+ (один электрон в поле ядра с зарядом $+2e$) точно в Z^2 раз больше, чем атома водорода (см. (2.7), (13.33)):

$$(\varepsilon_{\text{ion}})_{\text{He}^+} = 2^2 \cdot 13,6 = 54,4 \text{ эВ},$$

а для атома гелия (два электрона, один из которых удаляется) она составляет 24,59 эВ. Таким образом, в атоме гелия из-за межэлектронного взаимодействия уровень каждого из электронов лежит существенно выше, чем в одноэлектронном ионе гелия – каждый из электронов экранирует поле ядра для своего "соседа".

Энергию электрона в сложном атоме можно оценить, вводя некоторый эффективный заряд ядра $eZ_{\text{эф}}$, такой, что энергия электрона, "находящегося" на n -м уровне, может быть выражена формулой, аналогичной (2.7), (13.33):

$$\varepsilon_{nl} = -Z_{\text{эф}}^2 \cdot \frac{\varepsilon_0}{n^2}, \quad \varepsilon_0 = \frac{e^2}{2R_{\text{Bohr}}} \approx 13,6 \text{ эВ}, \quad Z_{\text{эф}} = Z - \sigma_{nl}, \quad (15.5)$$

где σ_{nl} – постоянная экранирования, учитывающая приближённо взаимодействие между электронами. Очевидно, что σ_{nl} возрастает с ростом n и ℓ , т.е. чем дальше "живёт" электрон от ядра, тем сильнее экранировка ядра остальными электронами. Для внешнего электрона, очевидно, $Z_{\text{эф}} \approx 1$ (т.е. $\sigma_{nl} \approx Z - 1$). Равенство становится точным в водородоподобных атомах. В водородоподобных ионах $Z_{\text{эф}} = q + 1$, где q – кратность ионизации (число удалённых электронов).

§ 15.2. Электронные конфигурации

Индивидуальные состояния электронов группируются по значениям квантовых чисел n и ℓ . Такой, хотя и приближённый, подход даёт качественно правильное описание строения атома. В соответствии с принципом Паули (§ 12.2) в состоянии с квантовыми числами n, ℓ, m, s может находиться не более одного электрона. Поскольку проекция спина на любое выделенное направление равна $s_z = +1/2$ или $-1/2$, то наличие спина у электрона приводит к удвоению числа возможных состояний для заданного n (13.37):

$$N_e = 2n^2. \quad (15.6)$$

Соответственно, максимальное число электронов на уровне n растёт с его номером:

$$\begin{aligned} n=1, \quad N_e &= 2, \\ n=2, \quad N_e &= 8, \\ n=3, \quad N_e &= 18 \text{ и т.д.} \end{aligned} \quad (15.7)$$

Мы вернёмся к этому вопросу в § 15.4 при обсуждении периодической таблицы Менделеева. Здесь же приведём принятые в литературе обозначения состояний

электронов. Поскольку каждое состояние характеризуется числами n и ℓ , то состояние электрона обозначают символами вида

$$n\ell \Rightarrow 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, \dots \quad (15.8)$$

В отличие от обозначения состояний атома (13.38), здесь для обозначения величины орбитального момента индивидуального электрона используются маленькие буквы:

$$\begin{array}{cccccccc} \ell = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & \dots \\ \text{символ состояния} & s & p & d & f & g & h & i & k & \dots \end{array} \quad (15.9)$$

Следующий шаг – обозначение электронных конфигураций ("устройств") электронных состояний. Как уже сказано, в состоянии с заданными n и ℓ может находиться вполне определённое количество электронов N . Пока мы не выделяли значение ℓ , их число равнялось $2n^2$. При заданных n и ℓ их число равно $2(2\ell+1)$ (см. (10.15)). Конфигурацию состояний n, ℓ принято обозначать символами $n\ell^N$:

$$\begin{aligned} & 1s^2, \\ & 2s^2, \quad 2p^6, \\ & 3s^2, \quad 3p^6, \quad 3d^{10}, \\ & \dots \end{aligned} \quad (15.10)$$

Эти электронные конфигурации состоят, таким образом, из слоёв – набор электронов с одинаковым значением n , а слои – из оболочек – набор электронов с одинаковым значением орбитального ℓ . Соответственно, говорят о слоях K, L, M, \dots (§ 15.4 ниже, табл. 15.1) и оболочках s, p, d, f, \dots . Эта довольно запутанная терминология сложилась исторически при развитии оптической спектроскопии.

§ 15.3. Суммарный момент атома

Состояние сложного атома как целого характеризуется определённым значением энергии. В случае водородоподобных атомов и ионов это просто энергия внешнего электрона (2.7), (13.33). Если же во внешней оболочке находится несколько электронов, то картина сложнее: вклад в значение энергии внешних электронов дают внутренние электроны атома, и значение этой энергии

(соответственно, структура уровней энергии) существенно зависит от значения полного момента атома.

Различают два крайних случая. Первый из них – случай так называемой *нормальной связи* (её также называют *приближением Рессель–Саундерса* или *LS-связью*). В этом приближении орбитальные и спиновые моменты электронов складываются по отдельности (сравни (11.3)):

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i, \quad \vec{S} = \sum_i \vec{S}_i, \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (15.11)$$

Уровни энергии характеризуются теперь квантовыми числами n, L, S, J . Их, в отличие от водородоподобных ("одноэлектронных") атомов, обозначают большими буквами, что вносит, к сожалению, некоторую путаницу. О правилах сложения моментов мы уже говорили в § 10.5 (см. также задачу 10.6). Аналогичны правила сложения спиновых моментов. Квантовое число полного момента атома в случае нормальной связи в соответствии с теми же правилами может иметь одно из возможных значений

$$J = L + S, \quad L + S - 1, \quad \dots, \quad |L - S|. \quad (15.12)$$

Такой вид связи является наиболее распространённым. Он реализуется, если электростатическое взаимодействие существенно сильнее спин-орбитального.

Второй случай, именуемый *jj-связью*, имеет место, когда спин-орбитальное взаимодействие существенно превышает электростатическое (кулоновское). Этот случай реализуется в тяжёлых атомах. В них орбитальный \vec{L}_i и спиновый \vec{S}_i моменты каждого электрона складываются в его полный момент \vec{J}_i , а потом уже эти моменты формируют полный момент атома.

В случае нормальной связи структуру уровней атома обозначают символом

$$n^k A_J, \quad (15.13)$$

где n – номер термина (уровня энергии), k – число возможных состояний на уровне n с данными L и J . Символ A , обозначаемый заглавными буквами S, P, D, F, \dots , означает величину полного орбитального момента атома, J – величина его полного момента. Возможны значения суммарного спинового момента S :

$$S = \begin{cases} 0, 1, 2, 3, \dots - \text{чётное число электронов,} \\ 1/2, 3/2, 5/2, 7/2, \dots - \text{нечётное число электронов} \end{cases}$$

в атоме. При заданном числе S возможное число состояний, очевидно, есть

$$k = 2S + 1. \quad (15.14)$$

Если это неочевидно, то напомним правило квантования момента (10.13).

Например, следующие уровни имеют квантовые числа

$$2^2 P_{3/2} \Rightarrow n=2, \quad S=1/2, \quad L=1, \quad J=3/2,$$

$$3^4 D_{5/2} \Rightarrow n=3, \quad S=3/2, \quad L=2, \quad J=5/2.$$

§ 15.4. Периодическая таблица элементов Д.И. Менделеева

Периодический закон Д.И. Менделеева и его Периодическая таблица элементов (1869 г.) находят объяснение в квантовой механике в результате анализа электронных конфигураций (Н. Бор, 1922 г.).

Заполнение электронных слоёв и оболочек по мере роста атомного номера Z элемента происходит в соответствии с возможными значениями квантовых чисел, и для каждого вида атомов электронная оболочка имеет вполне определённую структуру, которая строится в соответствии с *принципом Паули* (§ 12.2). "Идеальный" порядок заполнения слоёв электронами представлен в табл. 15.1, где N – максимальное число электронов в оболочке. Природа, однако, устроена сложнее, и *последовательность заполнения слоёв* нарушается с ростом Z

Таблица 15.1. Слои и оболочки атомов и максимальное число N_{\max} в оболочке

Слой	K		L			M			N				P					
n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Оболочка	s	s	p	s	p	d	s	p	d	f	s	p	d	f	g			
ℓ	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4			
$N_{\max} = 2\ell(\ell + 1)$	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	18			
Конфигурация	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$3d^{10}$	$4s^2$	$4p^6$	$4d^{10}$	$4f^{14}$	$5s^2$	$5p^6$	$5d^{10}$	$5f^{14}$	$5g^{18}$			

и номера слоя (табл. 15.2). Это происходит из-за усложнения "устройства" электрического поля атома по мере роста числа электронов: связь электрона с атомом ослабевает по мере его удаления от ядра с ростом номера слоя. Подтверждением этого является немонотонная зависимость энергии ионизации атомов от атомного номера Z (рис. 15.1). Начиная с 4-го периода, эта стройная последовательность нарушается, т.к. электроны с большим n , но меньшим ℓ могут быть прочнее связаны с атомом. Это вызвано большей вытянутостью их орбит (см. рис. 13.4 и 13.5). В результате такие электроны "проводят больше времени" ближе к ядру, чем их соседи из слоя с меньшими n и ℓ . Порядок заполнения оболочек (табл. 15.2) и отражает эту особенность строения атомов. Особенно ярко это проявляется в 6-м и 7-м периодах.

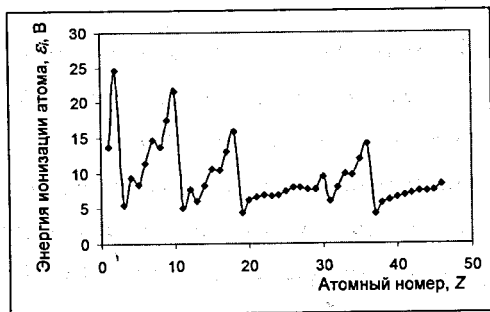


Рис. 15.1. Зависимость энергии ионизации атома ϵ_i от атомного номера Z [13]

Таблица 15.2. Последовательность заполнения внешних электронных оболочек элементов

n	1	2	3	4	5	6	7
ℓ	0	0 1	0 1	0 2 1	0 2 1	0 3 2 1	0 3
Конфигурация	$1s^2$	$2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^6$	$4s^2 3d^{10} 4p^6$	$5s^2 4d^{10} 5p^6$	$6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$	$7s^2 5f^{14}$
Период	1	2	3	4	5	6	7

Периодическая таблица элементов (табл. 15.3) разделена на семь *периодов*, каждый из которых делится на два *ряда* (строки таблицы) и восемь *групп*, по две *подгруппы* в каждой (столбцы таблицы). Все ячейки таблицы были, как известно, размещены Д.И. Менделеевым в соответствии с атомными весами и химическими свойствами элементов. Оказалось, что закономерности их расположения объясняются строением электронных оболочек.

Элементы с заполненными *d*- и *f*-оболочками или (более легкие) не имеющие их вовсе, называют элементами *главных групп*, а элементы, где происходит заполнение этих оболочек, относят к *промежуточным группам*. К главным группам относятся все элементы групп I A, B, II A, B, всех подгрупп "A" в группах III–VIII. *Периоды* таблицы начинаются с заполнения самой внешней оболочки и заканчиваются её заполнением. Поэтому первые элементы периода (водород и щелочные металлы) имеют на внешней оболочке электрон в *nS*-состоянии, а последние (инертные газы) – заполненную оболочку (чем и объясняется их "инертность"). Промежуточные элементы (табл. 15.4) имеют незаполненные внешние оболочки, а часть из них, при незаполненных внутренних, "начинают" строить внешние (см. ниже).

Таблица начинается с простейшего атома – *водорода*, единственный электрон которого находится в *1s*-состоянии. Соответственно, основной терм водорода $^2S_{1/2}$ ($L = 0$, $S = 1/2$, $J = 1/2$).

Следующий элемент таблицы – *гелий*. Основному состоянию этого атома отвечает электронная конфигурация $1s^2$. Его основной терм 1S_0 . На атоме гелия заканчивается заполнение *K*-оболочки.

Таблица 15.4. Число электронов в электронных слоях и оболочках атомов

Слой		K			L			M			N				O		Основной терм	Потенциал ионизации, В	
Оболочка		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p						
Z	Элемент	Число электронов в оболочке																	
1	H	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$	13,6		
2	He	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	24,6			
3	Li	2	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$	5,4			
4	Be	2	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	9,3			
5	B	2	2	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2P_{1/2}$	8,3			
6	C	2	2	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3P_0	11,3			
7	N	2	2	3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^4S_{3/2}$	14,53			
8	O	2	2	4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3P_2	13,6			
9	F	2	2	5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2P_{3/2}$	17,4			
10	Ne	2	2	6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	21,6			
11	Na	Конфигурация неона				1	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$	5,1			
12	Mg					2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	7,6
13	Al					2	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2P_{1/2}$	6,0
14	Si					2	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3P_0	8,15
15	P					2	3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^4S_{3/2}$	10,5
16	S					2	4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3P_2	10,4
17	Cl					2	5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2P_{3/2}$	13,0
18	Ar					2	6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	15,8
19	K	Конфигурация аргона				-	1	-	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$	4,3			
20	Ca					-	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	6,1
21	Sc					1	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2D_{3/2}$	6,56
22	Ti					2	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3F_2	6,8
23	V					3	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^4F_{3/2}$	6,7
24	Cr					5	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	7S_3	6,8
25	Mn					5	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^6S_{5/2}$	7,4
26	Fe					6	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5D_4	7,9
27	Co					7	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^4F_{9/2}$	7,88
28	Ni					8	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3F_4	7,6
29	Cu					10	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$	7,7
30	Zn					10	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	9,4
31	Ga					10	2	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2P_{1/2}$	6,0
32	Ge					10	2	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3P_0	7,9
33	As					10	2	3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^4S_{3/2}$	9,8
34	Se					10	2	4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3P_2	9,75
35	Br					10	2	5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2P_{3/2}$	11,8
36	Kr					10	2	6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	14,0
37	Rb	Конфигурация криптона				-	-	1	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$	4,2			
38	Sr					-	-	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	5,7
39	Y					1	-	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^2D_{3/2}$	6,2
40	Zr					2	-	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3F_2	6,6
41	Nb					4	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^6D_{1/2}$	6,76
42	Mo					5	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	7S_3	7,1
43	Tc					5	-	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^6S_{5/2}$	7,3
44	Ru					7	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5F_3	7,4
45	Rh					8	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$^4F_{9/2}$	7,5
46	Pd					10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1S_0	8,3

Согласно принципу Паули, в состоянии $1s$ может находиться не более двух электронов, поэтому третий электрон *лития* может занять лишь низшее свободное $2s$ -состояние. Основная электронная конфигурация атома лития $1s^2 2s$. Терм основного состояния, как и у водорода, $^2S_{1/2}$. Поскольку третий электрон лития занимает более высокий энергетический уровень, он оказывается связанным с ионным остовом значительно более слабо, чем первые два. В итоге именно этот валентный электрон определяет оптические и химические свойства лития.

С лития начинается заполнение оболочки с $n = 2$. У следующего элемента – *бериллия* – полностью заполняется оболочка $2s$. Основная электронная конфигурация $1s^2 2s^2$, терм основного состояния 1S_0 . У последующих шести элементов (B, C, N, O, F, Ne) происходит последовательное заполнение электронами оболочки $2p$. У неона полностью заполнен слой K (два электрона) и L (восемь электронов). Основная электронная конфигурация неона $1s^2 2s^2 2p^6$, отвечающий ей терм, как и у гелия, имеет вид 1S_0 .

Начиная с *натрия*, последовательно заполняются оболочки $3s$ и $2p$. Такое нормальное заселение продолжается вплоть до аргона ($Z = 18$), которому отвечают конфигурация $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ и терм 1S_0 инертного газа. Аргонном заканчивается третий период системы элементов.

При переходе к атому *калия* ($Z = 19$) процесс заполнения электронами M -слоя ($n = 3$) временно прерывается, а в атомах калия и следующего за ним *кальция* валентные электроны занимают не $3d$ -состояние, а лежащее ниже состояние $4s$.

Однако оболочка $4p$ лежит выше, чем $3d$, поэтому после $4s$ энергетически выгодным оказывается заполнение состояний $3d$. Поэтому у *скандия* ($Z = 21$) и следующих за ним элементов возобновляется нормальное заполнение слоя M .

Любопытно отметить, что у *хрома* ($Z = 24$) тенденция к заполнению оболочки $3d$ выражена столь ярко, что один из $4s$ -электронов переходит в $3d$ -состояние.

На атоме меди ($Z = 29$) заканчивается заполнение M -слоя, и в дальнейшем идёт заселение $4s$ - и $4p$ -состояний. Четвёртый период системы элементов, начинающийся с калия, заканчивается криптоном ($Z = 36$).

Нарушение нормального порядка заполнения состояний имеет место и у рубидия ($Z = 37$), с которого начинается пятый период системы элементов. Его 37-й электрон попадает не в $4d$ -, а в $5s$ -состояние. У следующих за рубидием элементов идёт своеобразная конкуренция между $4d$ - и $5s$ -состояниями.

На атоме палладия ($Z = 46$) заполняется $4d$ -состояние. Заканчивается пятый период системы элементов инертным газом ксеноном ($Z = 54$), у которого заполняется оболочка $5p$.

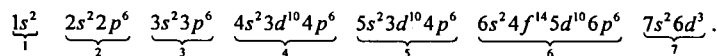
Рассмотренные закономерности заполнения оболочек позволяют понять периодическую повторяемость оптических и химических свойств атомов. Так, потенциал ионизации атома (рис. 15.1), зависящий от энергии связи валентного электрона в атоме, по мере заполнения оболочки хотя и не монотонно, но регулярно возрастает от атома щелочного металла (начало периода) до атома инертного газа (конец периода).

С точки зрения химических свойств наиболее важной характеристикой атома является его валентность. В химической связи участвуют только неспаренные электроны. Электроны, находящиеся в заполненных оболочках и имеющие нулевой суммарный спин, в образовании химических связей не участвуют.

Таким образом, принцип Паули даёт не только обоснование порядка расположения элементов в периодической системе, но позволяет понять оптические и химические свойства атомов.

Задача 15.1. Построить электронные конфигурации элемента ${}_{105}\text{Db}$ (дубний).

Атом дубния содержит 105 электронов и находится в 7-м периоде и V-й группе. Можно сказать, что у него заполнены 6 слоёв, до Q -слоя включительно, и начато "строительство" R -слоя. Существенно, что у его соседей "снизу" — Ra, Ac, Rf — заполнена $7s^2$ -оболочка и начато заполнение "пропущенной" $6d$ -оболочки. Поэтому электронные конфигурации дубния выстраиваются следующим образом (снизу указаны номера периодов):



К настоящему времени усилиями учёных ОИЯИ (Дубна, Россия), Исследовательского центра тяжёлых ионов (Дармштадт, Германия) и Национальной лаборатории им. Э. Лоуренса (Беркли, США) таблица Менделеева продлена до 118 элемента (не синтезирован пока 117-й элемент).

ГЛАВА 16. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ, ЗАВИСЯЩИХ ОТ ВРЕМЕНИ

§ 16.1. Возмущения, зависящие от времени

Если в уравнении Шрёдингера (6.15) потенциальная энергия зависит от времени

$$U = U(\vec{r}, t), \quad (16.1)$$

то стационарных состояний не существует, т.е. энергия системы изменяется со временем. Но можно найти приближенное решение, если, аналогично (14.3), представить гамильтониан системы в виде стационарной части и малого возмущения, зависящего от времени:

$$\hat{H}(\vec{r}, t) = \hat{H}_0(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r}, t). \quad (16.2)$$

Тогда коэффициенты a_m в (14.5), вообще говоря, зависят от времени:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{m=1}^N a_m(t) \psi_m^0(\vec{r}, t), \quad (16.3)$$

и подстановку этого решения в уравнение Шрёдингера (6.15)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi \quad (16.4)$$

следует производить с учётом того, что "невозмущенные" функции $\psi^0(\vec{r}, t)$ удовлетворяют стационарной части этого уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_m^0}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi_m^0, \quad \psi_m^0 \propto e^{-iE_m^0 t / \hbar}. \quad (16.5)$$

Соответственно, получим

$$i\hbar \sum_{m=1}^N \psi_m^0 \cdot \frac{da_m}{dt} = \sum_{m=1}^N a_m \hat{V} \psi_m^0. \quad (16.6)$$

Умножив обе части слева и справа на $(\psi_k^0)^*$ и проинтегрировав по объёму, найдем с учётом условия (8.18) ортонормированности функций ψ_m^0

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_n V_{kn}(t) \cdot a_n, \quad (16.7)$$

где

$$V_{kn}(t) = \int (\psi_k^0)^* \hat{V} \psi_n^0 d^3r \equiv \langle k | \hat{V} | n \rangle. \quad (16.8)$$

Таким образом, уравнение для коэффициентов $a_m(t)$ свелось к нахождению, прежде всего, всё тех же матричных элементов (14.6), (14.7), которые теперь зависят от времени.

И не следует забывать, что условие нормировки $\psi(\vec{r}, t)$ даёт из (16.3)

$$\sum_{m=1}^N |a_m(t)|^2 = 1. \quad (16.9)$$

§ 16.2. Периодическое возмущение в двухуровневой системе

Рассмотрим применение теории возмущений, зависящих от времени, в случае *двухуровневой системы*, на которую действует возмущение

$$\hat{V}(t) = 2V_0(\vec{r}) \cos \omega_0 t = V_0(\vec{r})(e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}), \quad \omega_0 = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\hbar}, \quad (16.10)$$

где $\varepsilon_{1,2}$ — энергии уровней. Таким образом, мы рассматриваем случай *резонансного возмущения*, наиболее важный для дальнейших обсуждений.

Волновые функции невозмущенных состояний системы представим в виде

$$\psi_{1,2}^0(\vec{r}, t) = \psi_{1,2}^0(\vec{r}) \cdot e^{-i\varepsilon_{1,2}t/\hbar}.$$

Тогда волновая функция возмущённой системы описывается выражением

$$\psi(r, t) = a_1(t) \cdot \psi_1^0(\vec{r}) \cdot e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} + a_2(t) \cdot \psi_2^0(\vec{r}) \cdot e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar}. \quad (16.11)$$

В этом случае матричные элементы (16.8) принимают вид

$$\begin{aligned} V_{11} &= V_{11}^0(e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}), \\ V_{12} &= V_{12}^0(1 + e^{-2i\omega_0 t}), \\ V_{21} &= V_{21}^0(e^{2i\omega_0 t} + 1), \\ V_{22} &= V_{22}^0(e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}), \end{aligned} \quad \text{где } V_{ik}^0 = \int (\psi_i^0(\vec{r}))^* \cdot V_0(\vec{r}) \cdot \psi_k^0(\vec{r}) \cdot d^3r \equiv \langle i | V_0 | k \rangle. \quad (16.12)$$

Соответственно, уравнения для коэффициентов возмущенной волновой функции (16.7) получим в виде

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_1}{dt} &= V_{11}a_1 + V_{12}a_2, \\ i\hbar \frac{da_2}{dt} &= V_{21}a_1 + V_{22}a_2. \end{aligned} \quad (16.13)$$

Нас интересуют медленные, по сравнению с частотой ω_0 , изменения состояния системы. Поэтому усредним уравнения (16.13) по периоду $T_0 = 2\pi/\omega_0$, вынеся коэффициенты a_1, a_2 из-под интегралов усреднения. Найдем

$$\overline{V_{11}a_1}^{T_0} \equiv \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} V_{11}(t) \cdot a_1(t) \cdot dt \approx \frac{2a_1}{T_0} \int_0^{T_0} \cos \omega_0 t \cdot dt = 0,$$

$$\overline{V_{12}a_2}^{T_0} \approx V_{12}^0 a_2(t), \quad \overline{V_{21}a_1}^{T_0} = V_{21}^0 a_1(t), \quad \overline{V_{22}a_2}^{T_0} = 0.$$

Черта над выражением — символ усреднения по интервалу времени T_0 .

Заметим также, что $V_0(\vec{r})$ по своему физическому смыслу есть действительная величина (амплитуда энергии). Поэтому введём обозначение

$$V_{12}^0 = (V_{21}^0)^* \equiv \hbar \Omega_V, \quad (16.14)$$

где Ω_V — величина, имеющая размерность частоты. Тогда усредненные уравнения (16.13) можно представить в виде

$$\frac{da_1}{dt} \approx -i\Omega_V a_2, \quad \frac{da_2}{dt} = -i\Omega_V^* a_1. \quad (16.15)$$

Дифференцируя первое уравнение и подставляя в него \dot{a}_2 из второго, получим

$$\frac{d^2 a_1}{dt^2} + |\Omega_V|^2 \cdot a_1 = 0, \quad (16.16)$$

откуда

$$a_1(t) = ae^{i\Omega_V t} + be^{-i\Omega_V t}, \quad (16.17)$$

где a и b – неизвестные пока константы. Из первого уравнения затем найдём

$$a_2(t) = \frac{i}{\Omega_V} \cdot \frac{da_1}{dt} = \frac{|\Omega_V|}{\Omega_V} (a \cdot e^{i\Omega_V t} - b \cdot e^{-i\Omega_V t}). \quad (16.18)$$

Для определения констант a и b предположим, что при $t = 0$ система находилась в невозмущённом состоянии 1, т.е.

$$\psi(\vec{r}, 0) = \psi_1^0(\vec{r}, 0).$$

С другой стороны, наше решение при $t = 0$ имеет значение

$$\psi(\vec{r}, 0) = a_1(0) \cdot \psi_1^0(\vec{r}, 0) + a_2(0) \cdot \psi_2^0(\vec{r}, 0).$$

Приравняв оба эти значения $\psi(\vec{r}, 0)$ друг другу, имеем

$$a_1(0) = 1, \quad a_2(0) = 0.$$

Подставив сюда значения $a_1(0)$ (16.17) и $a_2(0)$ (16.18), получим уравнения

$$a + b = 1, \quad a - b = 0,$$

откуда

$$a = b = \frac{1}{2}.$$

Подставив значения a и b в (16.17), (16.18) и затем полученные значения $a_1(t)$, $a_2(t)$ в (16.11), получим функцию возмущенной системы

$$\psi(\vec{r}, t) = \cos |\Omega_V| t \cdot \psi_1^0(\vec{r}, t) + i \sin |\Omega_V| t \cdot \psi_2^0(\vec{r}, t). \quad (16.19)$$

Поскольку вероятность обнаружить систему в состоянии 1 или 2 равна квадрату модуля коэффициента перед ψ_1^0 или ψ_2^0 соответственно, то мы имеем

$$P_1(t) = \frac{1}{2} (1 + \cos 2\Omega_V t), \quad P_2(t) = \frac{1}{2} (1 - \cos 2\Omega_V t). \quad (16.20)$$

Таким образом, под действием периодического резонансного возмущения система непрерывно переходит из одного состояния в другое с частотой Ω_V (16.14) (рис. 16.1). Это явление называют *интерференцией состояний*, а состояние, в котором пребывает квантовая система, – *смешанным состоянием*. В отличие от *чистого состояния*, в котором поведение системы описывается одной волновой функцией с определённым набором квантовых чисел, в смешанном состоянии

имеет место линейная комбинация волновых функций – двух, как в (16.19), или нескольких в более сложных случаях.

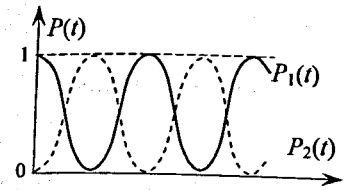


Рис. 16.1. Вероятность обнаружения двухуровневой системы в одном из двух состояний при воздействии периодического резонансного возмущения

§ 16.3. "Кратковременные" возмущения

Рассмотрим теперь действие возмущения, ограниченного во времени. Первое заключение можно сделать, используя результат предыдущего раздела. Пусть резонансное возмущение включается в момент $t = 0$ и выключается в момент $t > 0$. И пусть в начальный момент двухуровневая система находится в состоянии i (*initial*). Второй уровень обозначим буквой f (*final*). Тогда согласно (16.20) с вероятностью $P_i(t)$ мы обнаружим систему в состоянии i и с вероятностью $P_f(t)$ в состоянии f .

Подчеркнем, что решение (16.19) справедливо и для случая кратковременного (ограниченного во времени) возмущения, если только оно включается и выключается мгновенно. В случае плавной зависимости возмущения от времени те же уравнения (16.13) можно использовать приближенно, что мы и сделаем, следуя [6], лекция 23.

Пусть возмущение $\hat{V}(\vec{r}, t)$ можно представить в виде

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = \hat{V}_0(\vec{r}) \cdot f(t), \quad (16.21)$$

где $f(t)$ – некоторая (известная) функция времени. Тогда при $t = 0$ имеем

$$a_i(0) = 1, \quad a_f(0) = 0.$$

Будем искать решение $a_f(t)$ методом последовательных приближений (сравни § 14.1):

$$a_i(t) = a_i^0 + a_i^{(1)}, \quad a_f(t) = a_f^0 + a_f^{(1)},$$

где

$$a_i^0 \equiv a_i(0) = 1, \quad a_f^0 = a_f(0) = 0.$$

Тогда из второго уравнения (16.13) с учётом значения V_{ik}^0 из (16.12) найдём

$$a_f^{(1)}(t) \approx \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{fi}(t') \cdot dt', \quad (16.22)$$

$$V_{fi}(t) = \int (\psi_f^0(\vec{r}, t))^* \cdot \hat{V}(\vec{r}, t) \cdot \psi_i^0(\vec{r}, t) \cdot d^3r.$$

Используя выражения для невозмущенных волновых функций

$$\psi_{i,f}^0(\vec{r}, t) = \psi_{i,f}^0(\vec{r}) \cdot e^{-ie_{i,f}t/\hbar}, \quad (16.23)$$

представим (16.22) в виде

$$a_f^{(1)}(t) \approx \frac{V_{fi}^0}{i\hbar} \int_0^t f(t') \cdot e^{i\omega_{fi}t'} dt', \quad \omega_{fi} = \frac{\epsilon_f - \epsilon_i}{\hbar}, \quad (16.24)$$

$$V_{fi}^0 = \int (\psi_f^0(\vec{r}))^* \cdot V_0(\vec{r}) \cdot \psi_i^0(\vec{r}) \cdot d^3r \equiv \langle f | V_0 | i \rangle.$$

Величину V_{fi}^0 также называют *матричным элементом возмущения*.

Вероятность обнаружить систему в момент t в состоянии f (вероятность перехода $i \rightarrow f$) найдём аналогично (16.20)

$$P_{i \rightarrow f}(t) = |a_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{fi}^0|^2}{\hbar^2} \cdot \left| \int_0^t f(t') \cdot e^{i\omega_{fi}t'} \cdot dt' \right|^2. \quad (16.25)$$

Вероятность обратного перехода $f \rightarrow i$, очевидно, равна

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

Рассмотрим случай *монохроматического возмущения*, которое включается при $t = 0$ и выключается в момент $t = T$:

$$f(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \sin \omega t, & 0 \leq t \leq T, \\ 0, & T \leq t. \end{cases} \quad (16.26)$$

Тогда интеграл по времени в (16.25) равен

$$\int_0^T \sin \omega t \cdot e^{i\omega_{fi}t} dt = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)T} - 1}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)T} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right).$$

При $\omega \sim \omega_{fi}$ второе слагаемое значительно больше первого, которым поэтому можно пренебречь. В этом случае вероятность перехода $i \rightarrow f$ равна квадрату модуля второго слагаемого в предыдущей формуле:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \cdot |V_{fi}^0|^2 \cdot \left(\frac{\sin \frac{(\omega_{fi} - \omega)T}{2}}{\omega_{fi} - \omega} \right)^2 \xrightarrow{\omega \rightarrow \omega_{fi}} \frac{|V_{fi}^0|^2 T^2}{4\hbar^2}. \quad (16.27)$$

Всякая волна является в действительности "не вполне монохроматической." Это практически неизбежно, т.к. любая модуляция амплитуды, в том числе "включение" – "выключение" излучения, приводит к размытию её спектра.

Случай плавного нарастания и спада возмущения рассмотрен в задаче 16.1.

Задача 16.1. Найти вероятность перехода (16.25) для случая "резонансного" возмущения $\omega = \omega_{fi}$ с гауссовой огибающей:

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = V_0(\vec{r}) \cdot f(t), \quad \text{где } f(t) = \cos \omega_{fi}t \cdot e^{-t^2/2\tau^2}. \quad (16.28)$$

Представив $\cos \omega_{fi}t$ в виде полусуммы комплексных экспонент, найдём вероятность перехода $i \rightarrow f$ в момент t (16.25):

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{|V_{fi}^0|^2}{\hbar^2} \cdot \left| \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(t')^2/2\tau^2} (e^{i\omega_{fi}t'} + e^{-i\omega_{fi}t'}) \cdot e^{i\omega_{fi}t'} \cdot dt' \right|^2,$$

где

$$V_{fi}^0 = \langle f | V_0 | i \rangle.$$

Интеграл по времени в этом выражении вычисляется просто в предположении $t \gg \tau$. Тогда верхний предел интеграла положим равным бесконечности и, используя тот же приём, что и в § 4.5 при выводе формулы (4.22), найдём

$$\text{Int}_{t \rightarrow \infty} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot (1 + e^{-2\omega_{fi}^2\tau^2}) \cdot \tau.$$

В результате для вероятности перехода получим

$$P_{i \rightarrow f}(\tau) = \frac{\pi}{8} \cdot \frac{|V_{fi}^0|^2}{\hbar^2} \cdot \tau^2 \cdot (1 - e^{-2\omega_f^2 \tau^2}). \quad (16.29)$$

Функция $P_{i \rightarrow f}(\tau)$ возрастает с увеличением τ , выходя на асимптоту

$$P_{i \rightarrow f}(\tau) \propto \tau^2 \quad \text{при} \quad \tau \gg \frac{1}{\omega_f},$$

что качественно совпадает с (16.27).

§ 16.4. Электрические дипольные переходы. Правила отбора

Рассмотрим атом, находящийся в поле *линейно-поляризованной* плоской электромагнитной волны

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(t) \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t), \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (16.30)$$

амплитуда которой, вообще говоря, зависит от времени. Если электрон находится на расстоянии \vec{R} от ядра, то дипольный момент атома есть $\vec{d} = (-e) \cdot \vec{R}$, где \vec{R} — радиус-вектор, проведённый из ядра к электрону. Выбрав начало отсчёта в точке расположения ядра (рис. 16.2), имеем $\vec{R} = \vec{r}$ и $\vec{d} = -e\vec{r}$.

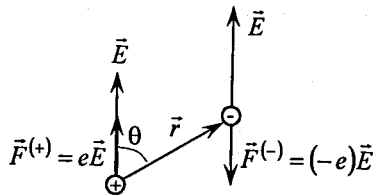


Рис. 16.2. Атом в поле плоской электромагнитной волны

Поскольку волна плоская, вектор $\vec{E}_0(t)$ направлен вдоль одного фиксированного направления, т.е. амплитуда волны есть

$$\vec{E}_0(t) = \vec{E}_0 \cdot F(t), \quad (16.31)$$

где $F(t)$ — скалярная функция времени, $|F(t)| \leq 1$. Ограничившись случаем $kr \ll 1$ ($\lambda \gg r$), будем считать поле постоянным на размере атома. Энергия диполя \vec{d} в

этом поле есть

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = -(\vec{d}, \vec{E}(\vec{r}, t)) \approx -(\vec{d}, \vec{E}_0) \cdot F(t) \cdot \cos \omega t. \quad (16.32)$$

Теперь у нас есть всё, чтобы воспользоваться результатами § 16.3. Оператор $\hat{V}(\vec{r}, t)$ представлен в форме (16.21), где в данном случае

$$\hat{V}_0(\vec{r}) = -(\vec{d}, \vec{E}_0), \quad f(t) = F(t) \cdot \cos \omega t. \quad (16.33)$$

Подставив эти выражения в (16.25), выделим в явном виде постоянную часть амплитуды волны \vec{E}_0 . Получим *вероятность дипольного перехода* $i \rightarrow f$ в поле линейно-поляризованной электромагнитной волны

$$P_{i \rightarrow f} = \left(\frac{E_0}{\hbar}\right)^2 \cdot |d_{fi}|^2 \cdot \left| \int_0^t F(t') \cdot \cos \omega t' \cdot e^{i\omega_f t'} dt' \right|^2,$$

где

$$d_{fi} = \int (\psi_f^0)^* (\vec{d}, \vec{e}_0) \psi_i^0 d^3r \equiv \langle f | (\vec{d}, \vec{e}_0) | i \rangle \quad (16.34)$$

— *матричный элемент электрического дипольного момента* перехода $i \rightarrow f$ в поле *линейно-поляризованной* электромагнитной волны и $\vec{e}_0 = \vec{E}_0 / E_0$ — единичный вектор вдоль направления поля \vec{E}_0 .

Подставив в выражение для $P_{i \rightarrow f}$ формулу

$$\cos \omega t = \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}),$$

повторим рассуждение, проведённое при выводе (16.27) для монохроматического излучения: если функция $F(t)$ гладкая, то в результате интегрирования преобладающим из двух слагаемых будет то, которое содержит разность $\omega_f - \omega$.

На этом основании запишем окончательно

$$P_{i \rightarrow f} \approx \left(\frac{E_0}{\hbar}\right)^2 \cdot |d_{fi}|^2 \cdot \left| \frac{1}{2} \int_0^t F(t) \cdot e^{i(\omega_f - \omega)t} dt \right|^2. \quad (16.35)$$

Задача 16.2. Вычислить матричные элементы электрического дипольного момента для перехода между уровнями 1 и 2 в атоме водорода.

Направим ось z вдоль вектора \vec{e}_0 , записав

$$(\vec{d}, \vec{e}_0) = d \cos \theta = er \cdot \cos \theta, \quad (16.36)$$

и воспользуемся функциями (13.43), (13.46), (13.49). Функция ψ_{nl} зависит только от координаты r . Поэтому для перехода $1S_{1/2} \leftrightarrow 2S_{1/2}$ найдем

$$d(1S_{1/2}/2S_{1/2}) = \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \psi_{2S}^*(r) \cdot er \cos \theta \cdot \psi_{1S}(r) r^2 dr \cdot 2\pi \sin \theta \cdot d\theta = 0.$$

Таким образом, переход $1S \leftrightarrow 2S$ запрещен для электрических дипольных переходов. Для перехода $1S_{1/2} \leftrightarrow 2P_{1/2}$ ($\ell = 1, m = 0$) найдем

$$\begin{aligned} d(1S_{1/2}/2P_{1/2}) &= \int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \frac{e^{-r/2a_0}}{4\sqrt{2\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \cos \theta \cdot er \cdot \cos \theta \cdot \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{\pi r_0^{3/2}}} = \\ &= \frac{er_0}{3\sqrt{2}} \int_0^{\infty} e^{-3r/2} \cdot x^4 dx = \frac{er_0}{3\sqrt{2}} \cdot \frac{4!}{(3/2)^5} = \frac{2^{15/2}}{3^5} \cdot er_0 = 0,74493 \cdot er_0. \end{aligned} \quad (16.37)$$

Для перехода $1S_{1/2} \leftrightarrow 2P_{3/2}$ ($\ell = 1, m = \pm 1$) аналогично найдём

$$d(1S_{1/2}/2P_{3/2}) = \int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \frac{e^{-r/2a_0}}{8\sqrt{\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \sin \theta \cdot e^{i\varphi} \cdot er \cdot \cos \theta \cdot \frac{e^{-r/2a_0}}{\sqrt{\pi r_0^{3/2}}} = 0.$$

Подчеркнем, что этот результат справедлив только для линейно-поляризованной волны (см. задачу 16.4 ниже).

Задача 16.3. Вычислить матричный элемент электрического дипольного момента для перехода между уровнями тонкой структуры атома водорода $2S_{1/2}$ и $2P_{1/2}$ ($m = 0$).

$$\begin{aligned} d(2S_{1/2}/2P_{1/2}) &= \int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \frac{e^{-r/2a_0}}{4\sqrt{2\pi} \cdot r_0^{3/2}} \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \cos \theta \cdot er \cos \theta \cdot \frac{e^{-r/2a_0}}{4\sqrt{2\pi r_0^{3/2}}} \cdot \left(2 - \frac{r}{r_0}\right) = \\ &= \frac{er_0}{24} \int_0^{\infty} x^4 (2-x) e^{-x} dx = 3er_0. \end{aligned} \quad (16.38)$$

Сравнивая этот результат с полученным в задаче 14.1, приходим к заключению, что энергия расщепления уровней в статическом электрическом поле равна

$$\delta \varepsilon_{1,2}^{(1)} = \pm d \cdot E.$$

Результаты задач 16.2–16.3 показывают, что матричные элементы электрических дипольных переходов по порядку величины равны

$$d_{fi} \sim er_0. \quad (16.39)$$

Обнаруженный в задаче 16.2 факт равенства нулю матричного элемента $1S \leftrightarrow 2S$ перехода является частным случаем общей теоремы: матричные элементы электрических дипольных переходов между уровнями с одинаковыми квантовыми числами ℓ строго равны нулю.

Это утверждение можно доказать математически, используя структуру волновых функций атома водорода (13.41). При одинаковых ℓ элемент d_{fi} пропорционален (см. (10.30))

$$\begin{aligned} d_{fi} &\propto \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot Y_{\ell m_f}^*(\theta, \varphi) \cdot \cos \theta \cdot Y_{\ell m_i}(\theta, \varphi) = \\ &= \int_0^{2\pi} e^{i(m_f - m_i)\varphi} d\varphi \cdot \int_0^{\pi} P_{\ell}^{m_f}(\cos \theta) \cos \theta \cdot P_{\ell}^{m_i}(\cos \theta) \cdot \sin \theta \cdot d\theta. \end{aligned} \quad (16.40)$$

При $m_f \neq m_i$ первый из двух интегралов равен нулю, а при $m_f = m_i$ второй интеграл равен нулю. Действительно, в этом случае его можно привести к виду

$$\int_{-1}^1 (P_{\ell}^m(x))^2 \cdot x \cdot dx \equiv 0, \quad x \equiv \cos \theta. \quad (16.41)$$

А тогда подынтегральная функция есть произведение симметричной по x функции $(P_{\ell}^m(x))^2$ на антисимметричную, аргумент x . В результате получаем интеграл от несимметричной (антисимметричной) функции в симметричных пределах, который тождественно равен нулю. Таким образом, отличны от нуля только электрические дипольные моменты с изменением числа ℓ . При этом оказывается, что число ℓ не может меняться произвольно. В теории шаровых функций показывается, что интеграл (16.41) отличен от нуля при $\ell_f \neq \ell_i$ если

$$\ell_f = \ell_i \pm 1, \quad m_f = m_i. \quad (16.42)$$

Второе из этих условий мы уже получили из (16.40), а первое (точнее, его достаточность) непосредственно следует из свойств симметрии шаровых функций (10.34). Действительно, интеграл от полиномов $P_{\ell}^m(\cos \theta)$ в (16.40) можно представить в виде, аналогичном (16.41):

$$\int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta) \cos\theta \cdot P_{\ell'}^m(\cos\theta) \cdot \sin\theta d\theta = \int_{-1}^1 P_\ell^m(x) \cdot P_{\ell'}^m(x) \cdot x \cdot dx.$$

Поскольку $P_\ell^m(x) = (-1)^\ell \cdot P_\ell^m(-x)$ (см. (10.33), (10.34)), то подынтегральная функция симметрична и интеграл может быть отличен от нуля, только если

$$\ell \pm \ell' \pm 1 = 2k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (16.43)$$

Очевидно, что это равенство удовлетворяется для $\ell = \ell_f$ и $\ell' = \ell_i$ из (16.42).

Тем самым сформулировано *правило отбора разрешенных переходов в случае линейно-поляризованного излучения* – условие (16.42).

Обратимся к случаю возмущения в виде волны с круговой поляризацией, или *циркулярно-поляризованной волны*. Теперь направление вектора \vec{E} не является выделенным, т.к. оно меняется во времени (рис. 16.3), и в качестве выделенного направления, т.е. оси z , естественно выбрать направление распространения волны.

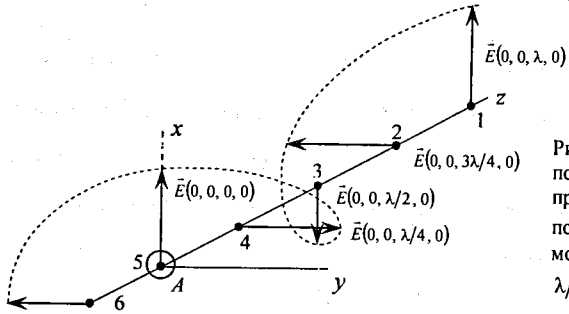


Рис. 16.3. Атом (A) в поле циркулярно-поляризованной волны. Волна с правой циркулярной поляризацией, показаны положения вектора \vec{E} в момент $t=0$, в точках 1–6 с шагом $\lambda/4$; $\vec{E}(0,0) = \vec{e}_x E_0$.

Вместо (16.30) имеем

$$\vec{E}(z, t) = \vec{e}_x \cdot E_0(t) \cdot \cos(kz - \omega t) + \vec{e}_y \cdot E_0(t) \cdot \sin(kz - \omega t). \quad (16.44)$$

Начало отсчёта выбрано так, что $t=0$ в точке расположения атома ($z=0$), вектор \vec{E} направлен вдоль оси x . Тогда формулу потенциальной энергии (16.32) следует записать в виде

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = -e \cdot (\vec{r}, \vec{E}(0, t)) = e E_0(t) \cdot (x \cdot \cos \omega t - y \cdot \sin \omega t). \quad (16.45)$$

Переходя от декартовых координат к сферическим (r, θ, ϕ), получим

Переходя от декартовых координат к сферическим (r, θ, ϕ), получим

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = e \cdot r \cdot \sin \theta \cdot E_0(t) \cdot \cos(\omega t + \phi) = \frac{e \cdot E_0(t)}{2} \cdot r \cdot \sin \theta \cdot (e^{i(\omega t + \phi)} + e^{-i(\omega t + \phi)}).$$

Зависимость $E_0(t)$ удобно сохранить в прежнем виде (16.31). Для такой формы потенциала нельзя воспользоваться формулой (16.25), так как переменные времени (t) и координаты (ϕ) "запутаны" и оператор потенциала не удаётся представить в виде (16.21). Поэтому, сделав "шаг назад", воспользуемся формулами (16.22). Волновые функции невозмущённых состояний i, f можно по-прежнему использовать в форме (16.23). Получим

$$P_{i \rightarrow f}(t) = |a_{fj}^{(i)}(t)|^2 = \left(\frac{E_0}{\hbar} \right)^2 \cdot |I_1 + I_2|^2, \quad (16.46)$$

$$I_{1,2} = \int (\psi_f^0(\vec{r}))^* \cdot (e r \cdot \sin \theta \cdot e^{\pm i\phi}) \cdot \psi_i^0(\vec{r}) \cdot d^3 r \cdot \frac{1}{2} \int_0^t F(t) \cdot e^{i(\omega_f \pm \omega)t} dt.$$

Сравнивая полученное выражение с (16.34), (16.35), видим, что множитель в скобках в интеграле по $d^3 r$ играет ту же роль, что и произведение (\vec{d}, \vec{e}_0) в (16.34). Поэтому, аналогично (16.34), можно ввести *матричные элементы электрического дипольного перехода в поле циркулярно-поляризованной электромагнитной волны*

$$d_{\text{circ}}^{(\pm)} = \int (\psi_f^0)^* (\vec{d}, \vec{e}_z) \cdot e^{\pm i\phi} \cdot \psi_i^0 \cdot d^3 r \equiv \left\langle f \left| (\vec{d}, \vec{e}_z) \cdot e^{\pm i\phi} \right| i \right\rangle. \quad (16.47)$$

Здесь \vec{e}_z – единичный вектор вдоль оси z (рис. 16.3). Теперь этих дипольных элементов два, а они входят в интегралы I_1, I_2 , т.е. "замешаны" с интегралами по времени. Результат упрощается, если частота возмущения близка к частоте перехода $\omega \approx \omega_f$. В этом случае, если функция $F(t)$ гладкая, т.е. мало изменяется на периоде колебаний поля $2\pi/\omega$ и плавно нарастает от нуля до единицы, спадая затем вновь до нуля, интеграл по времени в (16.46), содержащий $e^{i\omega t}$, имеет экспоненциально малую величину. Это иллюстрирует пример с гауссовой функцией в задаче 16.1. Поэтому из двух матричных элементов преобладает d_{circ}^- , и выражение для $P_{i \rightarrow f}$ для циркулярно-поляризованной волны принимает вид

Этот результат совпадает с (16.35) – вероятностью перехода в поле линейно-поляризованной волны. Отличие состоит в замене $\cos\theta$ на $\sin\theta$, что вызвано выбором другого направления в качестве оси z . Но главный результат состоит в том, что снова можно повторить анализ возможных значений ℓ и m (16.40)–(16.43). Действительно, подставив в интеграл по d^3r выражения для $\psi_{f,i}^0(\vec{r})$ через шаровые функции (10.30), получим, аналогично (16.40), что параметры I_1 и I_2 содержат произведения интегралов вида

$$I_{1,2} \propto \int_0^{2\pi} e^{i(m_f - m_i)\varphi} \cdot e^{\pm i\varphi} \cdot d\varphi \cdot \int_0^\pi P_{\ell_f}^{m_f}(\cos\theta) \cdot P_{\ell_i}^{m_i}(\cos\theta) \cdot \sin^2\theta d\theta.$$

Очевидно, что интеграл по φ отличен от нуля, если

$$m_f - m_i \pm 1 = 0.$$

Интеграл по θ проанализируем, как и выше, записав его в виде

$$I_{1,2}^{(0)} \equiv \int_{-1}^1 P_\ell^m(x) \cdot P_{\ell'}^{m'}(x) \cdot \sqrt{1-x^2} dx, \quad x = \cos\theta, \quad \ell = \ell_f, \quad \ell' = \ell_i, \quad m_f = m, \quad m_i = m \pm 1.$$

Подставив сюда выражения (10.28) для $P_\ell^m(x)$, получим

$$I_{1,2}^{(0)} = \frac{1}{2^{\ell+\ell'} \cdot \ell! \cdot \ell'!} \cdot \int_{-1}^1 (1-x^2)^{\ell+m} \cdot \frac{d^{\ell+m}(x^2-1)^\ell}{dx^{\ell+m}} \cdot \frac{d^{\ell'+m+1}(x^2-1)^{\ell'}}{dx^{\ell'+m+1}} \cdot dx.$$

Достаточно просто убедиться, что при $\ell = \ell'$ этот интеграл равен нулю.

Действительно, в случае верхнего знака "+", беря его по частям, найдём

$$I_{1,2}^{(0)}(\ell = \ell') = \frac{1}{2^{2\ell}(\ell!)^2} \cdot \left\{ \left[(1-x^2)^{\ell+1} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{d^{\ell+m}(x^2-1)^\ell}{dx^{\ell+m}} \right)^2 \right]_{x=-1}^{x=+1} + (m+1) \int_{-1}^1 x \cdot (1-x^2)^{\ell+m} \cdot \left(\frac{d^{\ell+m}(x^2-1)^\ell}{dx^{\ell+m}} \right)^2 dx \right\}.$$

Первое слагаемое обращается в нуль при подстановке пределов, а второе равно нулю как интеграл от несимметричной функции в симметричных пределах.

Совершенно аналогично доказывается, что интеграл $I_2^{(0)}(\ell' = \ell)$ (случай нижнего знака "-") также равен нулю.

Совершенно аналогично доказывается, что интеграл $I_2^{(0)}(\ell' = \ell)$ (случай нижнего знака "-") также равен нулю.

Из приведённого доказательства не следует, однако, что только в случае $\ell' = \ell \pm 1$ интегралы $I_{1,2}^{(0)}(\ell, \ell')$ отличны от нуля. Чтобы строго доказать это утверждение, приходится привлекать достаточно сложный аппарат теории полиномов Лежандра. Читатель может самостоятельно убедиться в справедливости этого утверждения для частного случая нижних уровней атома водорода, воспользовавшись выражениями для шаровых функций (10.31).

Сформулируем окончательно *правила отбора* разрешённых *электродипольных переходов*

$$\ell_f = \ell_i \pm 1, \quad m_f = \begin{cases} m_i, & \text{линейная поляризация,} \\ m_i \pm 1, & \text{круговая поляризация.} \end{cases} \quad (16.49)$$

Отметим также, что условие $\Delta\ell = \pm 1$ означает *изменение чётности состояния* на единицу (см. (10.34)). Таким образом, *электродипольные переходы происходят с изменением чётности состояния*. При этом, строго говоря, разрешены электродипольные переходы, если

$$P_i \cdot P_f = -1, \quad \Delta J = 0, \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \pm 1. \quad (16.50)$$

Условие для Δm_j – следствие условия для ΔJ .

Результат (16.49) справедлив, строго говоря, для водорода и водородоподобных атомов, т.к. для его доказательства использованы "водородные" волновые функции. Тем не менее он справедлив и в общем случае электродипольных переходов в сложных атомах. Это становится понятным, если учесть, что *собственный момент фотона* равен \hbar (см. § 11.1, задача 11.1). Поэтому при переходах $i \leftrightarrow f$ с поглощением или испусканием фотона с энергией $\hbar\omega_{fi}$ момент электрона может измениться лишь на величину

$$|\Delta \vec{L}| = \hbar, \quad \text{или} \quad \Delta\ell = \pm 1. \quad (16.51)$$

Знак "+" соответствует поглощению фотона и энергии, знак "-" – испусканию фотона и, соответственно, потере энергии. Таким образом, *первое правило отбора* в (16.49) есть следствие закона сохранения импульса.

Для выяснения физического смысла *второго правила отбора* (для магнитного квантового числа m) требуется также привлечь представления о спине фотона (задача 11.1). В случае линейно-поляризованной волны ось z направлена вдоль вектора $\vec{E}(t)$, в то время как спин фотона (право- или левополяризованный "винтик") всегда направлен вдоль вектора \vec{k} , т.е. оси x в данном случае (рис. 16.4, а). Поэтому проекция \vec{S}_{photon} на ось z равна нулю:

$$(m_{\text{photon}})_{\text{linear}} = 0, \quad (16.52)$$

и фотон, поглощённый или испущенный, не может изменить значение числа m у электрона. В случае циркулярно-поляризованной волны выделенным является направление вектора \vec{k} , вдоль которого мы и направили ось z (рис. 16.4, б). Соответственно,

$$(m_{\text{photon}})_{\text{circular}} = \pm 1, \quad (16.53)$$

что и даёт условие $\Delta m_{\text{electron}} = \pm 1$.

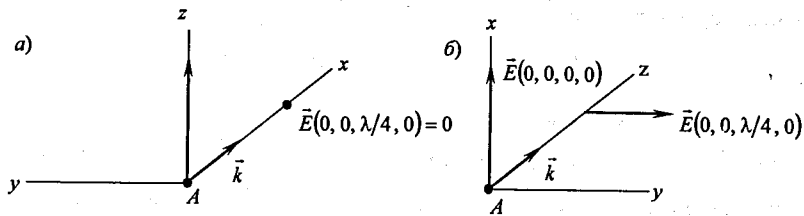


Рис. 16.4. Атом (A) в поле линейно- (а) и циркулярно- (б) поляризованной электромагнитной волны (см. (16.30), (16.44) и рис. 16.3)

Задача 16.4. Вычислить матричный элемент электрического дипольного момента для перехода $1S_{1/2} \leftrightarrow 2P_{3/2}$ ($\ell = 1$, $m = \pm 1$) в поле циркулярно-поляризованной волны $d_{\text{circ}}^{(-)}$.

Напомним, что теперь ось z направлена вдоль вектора \vec{k} . Волновые функции описываются, конечно, теми же выражениями (13.43) и (13.49), т.к. они чувствительны только к выбору осей, но не к их положению в пространстве (опять "квантовые фокусы" – что выбрали, то

и получили!). Поэтому (см. задачу 16.3) интеграл по φ выражения (16.47) для $d_{\text{circ}}^{(-)}$ ($1S_{1/2}/2P_{3/2}$) равен ($m = \pm 1$ в состоянии $2P_{3/2}$)

$$\int_0^{2\pi} e^{-i\varphi} \cdot e^{+i\varphi} \cdot d\varphi = 2\pi.$$

В интеграле по θ соответственно имеем

$$\int_0^{\pi} \sin \theta \cdot d\theta \cdot \sin \theta \cdot \sin \theta = \int_{-1}^1 (1 - \xi^2) d\xi = \frac{4}{3}.$$

Проинтегрировав по r , окончательно найдём

$$d(1S_{1/2}/2P_{3/2}) = \frac{er_0}{2} \int_0^{\infty} e^{-3x/2} \cdot x^4 \cdot dx \cdot \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{4}{3} \cdot 2\pi = \frac{2^{13/2}}{3^5} \cdot er_0,$$

что совпадает с (16.37).

Задача 16.5. Указать разрешённые и запрещённые электродипольные переходы между первыми тремя уровнями в атоме водорода.

Воспользовавшись рис. 13.3 (§ 13.3) и 14.5 (§ 14.5), найдём, что разрешены переходы

$$2P \leftrightarrow 1S, \quad 3P \leftrightarrow 2S, \quad 3D \leftrightarrow 2P, \quad 3S \leftrightarrow 2P, \quad 3P \leftrightarrow 2S,$$

но запрещены переходы между S -уровнями и между S - и D -уровнями ($\Delta \ell = 2$).

В спектроскопии атомов принято выделять так называемые *серии*. Хотя эта систематика сложилась исторически, ещё в "доквантовый" период, в квантовой атомной физике она обрела ясный смысл. Разность энергий уровней основной структуры (без учёта тонкого и сверхтонкого расщепления) следует из (13.33):

$$\Delta \mathcal{E}_{kn} = \mathcal{E}_1 \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (16.54)$$

Для атома водорода $\mathcal{E}_1 \approx \mathcal{E}_0 \approx -13,6$ эВ, и принято различать серии:

$1S \leftrightarrow nP$ переходы, $k=1, n \geq 2$ – серия Лаймана,
 $2S \leftrightarrow nP$ } переходы, $k=2, n > 2$ – серия Бальмера,
 $2P \leftrightarrow nS$ }
 $3S \leftrightarrow nP$ }
 $3P \leftrightarrow nS$ } $k=3, n > 3$ – серия Пашена,
 $3P \leftrightarrow nD$ }
 $3D \leftrightarrow nP$ }
 $3D \leftrightarrow nF$ }
 $k=4, n > 4$ – серия Брэкета,
 $k=5, n > 5$ – серия Пфунда.

Для щелочноземельных металлов основное состояние валентного электрона зависит от атомного номера элемента. Так, для Li это $2S$, для Na – $3S$, для K – $4S$ и т.д. Соответственно различают серии:

$kS \leftrightarrow nP$ – главная серия,
 $kP \leftrightarrow nS, nD, n > k$ – резкая серия,
 $kP \leftrightarrow nD$ – диффузная серия,
 $kD \leftrightarrow nF$ – основная серия.

§ 16.5. Квадрупольные электрические и дипольные магнитные переходы

Запрет на электродипольные переходы между уровнями с одинаковыми значениями числа ℓ не является абсолютным. Существуют возмущения более высокого порядка, по сравнению с дипольным. Переходы на основе этих возмущений возможны даже в случае запрета электродипольных переходов. Первое из таких возмущений – *электрическое квадрупольное*. Оценку потенциальной энергии квадрупольного возмущения получим, воспользовавшись простой электростатической моделью. Допустим, электронное "облако

вероятности" вытянуто в пространстве, как это имеет место в случае P -состояния атома водорода (рис. 13.5). Такое "облако" можно заменить сферой с изотропным распределением плотности электронного, т.е. отрицательного, заряда (плотности вероятности) и пары диполей с противоположно ориентированными дипольными электрическими моментами (рис. 16.5).

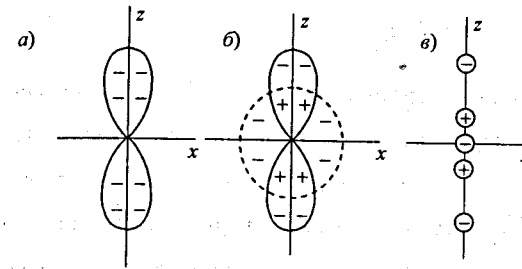


Рис. 16.5. Распределение плотности вероятности в P -состоянии атома электрона. (а) – эквивалентная электростатическая модель (б) – положительно заряженный шар и 4 области с зарядами разных знаков, точечный заряд и пара эквивалентных диполей (в)

Потенциальную энергию эквивалентного квадрупольного в поле волны оценим как разность энергий двух противоположно ориентированных диполей (рис. 16.5, в). Тогда в соответствии с (16.32) имеем

$$V_{\text{quad}} = -\left[(\vec{d}, \vec{E}(\vec{r}_1)) - (\vec{d}, \vec{E}(\vec{r}_2)) \right] \approx -d \cdot \left| \frac{\partial E}{\partial r} \right| \Delta r,$$

где \vec{r}_1 и \vec{r}_2 – радиусы-векторы, проведённые в центры диполей. Полагая

$$\Delta r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \sim r_0 \sim r_1 \sim r_2, \quad d \sim er_0, \quad r_0 \approx R_{\text{Bohr}} \quad (\text{см. (13.2) и (2.5)}),$$

$$\frac{\partial E}{\partial r} \approx \frac{\partial}{\partial x} (E_0 \cos(kx - \omega t)) = k \cdot E(x, t),$$

получим

$$V_{\text{quad}} \sim er_0^2 k \cdot E(t).$$

В свою очередь, (см. (2.7))

$$k = \frac{\omega_{fi}}{c} \approx \frac{(\Delta E)_{fi}}{ch} \sim \frac{E_0}{ch} = \frac{\alpha}{2r_0}, \quad \alpha \approx \frac{1}{137}.$$

Вероятность электрического квадрупольного перехода получим аналогично (16.34):

$$(P_{i \rightarrow j})_{\text{quad}} \sim \frac{E_0^2}{\hbar^2} \cdot |(d_{fi})_{\text{quad}}|^2, \quad (16.55)$$

где матричный элемент электрического квадрупольного момента по порядку величины равен

$$(d_{fi})_{\text{quad}} \sim er_0^2 \cdot k \sim \alpha \cdot er_0. \quad (16.56)$$

Сравнивая с (16.39), видим, что

$$(d_{fi})_{\text{quad}} \sim \alpha (d_{fi})_{\text{dipole}}, \quad (16.57)$$

а вероятность электроквадрупольного перехода в $\alpha^2 \approx 5 \cdot 10^{-5}$ раз меньше вероятности электродипольного перехода. Того же порядка оказывается *вероятность магнитодипольного перехода*, происходящего в результате взаимодействия магнитного поля электромагнитной волны с магнитным моментом атома. В § 14.3 мы оценили энергию такого взаимодействия (см. (14.34)) и далее). В нашем случае по порядку величины она равна

$$V_{\text{magn}} \sim \mu_B H(\vec{r}, t),$$

где $H(\vec{r}, t) = E(\vec{r}, t)$ – напряжённости поля волны. Повторяя оценки, проведённые для электроквадрупольного перехода, получим для *матричного элемента магнитодипольного момента*

$$(d_{fi})_{\text{magn}} \sim \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \cdot e = \frac{\alpha}{2} \cdot er_0, \quad (16.58)$$

т.е.

$$(d_{fi})_{\text{magn}} \sim (d_{fi})_{\text{quad}}.$$

Сравнивая результаты (16.56)–(16.58), видим, что

$$(d_{fi})_{\text{quad}} \sim (d_{fi})_{\text{magn}} \sim \alpha \cdot (d_{fi})_{\text{dipole}}, \quad (16.59)$$

т.е. вероятности электроквадрупольного и магнитодипольного переходов одного порядка и в α^2 раз меньше вероятности электродипольного перехода. Это не означает, однако, что такие переходы не играют существенной роли в поведении атомов. Они "вступают в игру", когда запрещены дипольные переходы. С одним примером такого запрета мы уже встречались – это переход $1S \leftrightarrow 2S$ (см. задачу 16.2).

Переходы электроквадрупольного и магнитодипольного типа происходят без изменения чётности состояния атома, что физически означает переходы с излучением фотонов, обладающих $P = +1$. Вероятности этих переходов, как уже сказано, значительно меньше, чем у электродипольных. Но зато такие переходы разрешены между уровнями тонкой и сверхтонкой структуры, т.е. *переходы между термами одного и того же мультиплета*.

§ 16.6. Вынужденное и спонтанное излучение атома.

Коэффициенты Эйнштейна

До сих пор мы всё время говорили об атоме в поле внешнего электромагнитного излучения, под действием которого атом может переходить из одного состояния в другое. При этом, если энергия состояния возросла, то, значит, атом поглотил фотон, если уменьшилась – испустил. Так, например, для перехода $1S \rightarrow 2P$ необходимо поглощение фотона с энергией (рис. 13.3)

$$\hbar\omega \approx 13,6 \cdot \frac{3}{4} = 10,2 \text{ эВ.}$$

Соответственно, при переходе $2P \rightarrow 1S$ испускается фотон такой же энергии. Приведём удобную для практических применений формулу, связывающую энергию фотона (энергию перехода) с длиной волны резонансного возмущения:

$$\varepsilon_{[\text{эВ}]} \approx \frac{12407}{\lambda_{[\text{Å}]}} = \frac{1,2407}{\lambda_{[\text{мкм}]}}. \quad (16.60)$$

Переходы под действием внешнего воздействия называются *вынужденными* или *стимулированными* (от греч. *stimul* – палка погонщика). В литературе употребляется также термин *индуцированные* переходы (англ. *induce* – заставлять). И их вероятность мы уже умеем вычислять, нужно только знать величину E_0 и тип волны.

Мы знаем, однако, что *возбуждённые атомы*, т.е. такие, в которых валентный или иной электроны каким-либо способом переведены из основного

состояния в состояние с повышенной энергией, рано или поздно теряют эту избыточную энергию, испуская фотон и возвращаясь в исходное состояние. Такие переходы называют *самопроизвольными* или *спонтанными* (лат. *spontaneus* – произвольный). До сих пор мы считали, что для перехода между уровнями электрон должен подвергнуться воздействию внешнего электромагнитного поля. В случае спонтанных переходов такого поля нет – атом может быть возбуждён коротким воздействием внешнего поля, которое затем быстро выключают, или другим способом, например, столкновением с другим, более быстрым атомом, со свободным электроном и т. п., а затем "предоставлен самому себе", когда внешнее электромагнитное поле вообще отсутствует. Что же вынуждает электрон покинуть более высокий энергетический уровень? Нерелятивистская квантовая механика не даёт ответа на этот вопрос, хотя и не запрещает такие переходы с потерей энергии на излучение. Ответ находится в релятивистской квантовой теории – квантовой электродинамике, и объяснение физического процесса спонтанного перехода связано с природой вакуума. Мы уже говорили, что по современным представлениям вакуум – газ, состоящий из виртуальных пар частиц и античастиц. В числе этих пар присутствуют и фотоны (причём антифотон и фотон различаются только направлением спина и чётностью). Взаимодействуя с "возбуждённым" электроном, фотон нужной поляризации "подталкивает" его, "понуждая" к переходу с испусканием реального фотона, и так многократно, пока не начнётся процесс испускания электроном реального излучения. И тогда оно воздействует на электрон – это такое "самонизвержение". Конечно, такая "квазиклассическая" картина является сильно упрощённой моделью, за которой стоит "стена" квантово-электродинамических расчётов.

И тем не менее квантовая механика позволяет получить правильные выражения для вероятностей переходов, используя определённые, но достаточно общие, соображения. Это так называемый *метод коэффициентов Эйнштейна* (А. Einstein, 1916 г.), разработанный им ещё на заре квантовой механики.

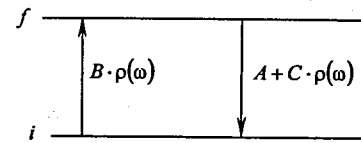


Рис. 16.6. Двухуровневая система: стимулированные и спонтанные переходы

Рассмотрим двухуровневую систему – атом, находящийся во внешнем электромагнитном поле. И будем считать, что газ, состоящий из этих атомов, находится в равновесии с излучением, частота которого является резонансной для $i \leftrightarrow f$ -переходов. Теперь названия *initial* и *final* для состояний являются условными, т.к. возможны переходы в обоих направлениях. Считаем, для определённости,

$$E_f > E_i.$$

В этом случае (рис. 16.6) из f в i возможны как спонтанные, так и вынужденные переходы, а из i в f – только вынужденные. Пусть вероятность вынужденных (стимулированных – индекс *st*) переходов дана по-прежнему формулами (16.35), (16.48). Производная $P_{i \rightarrow f}$ по времени есть вероятность перехода в единицу времени. Представим её в виде

$$\dot{P}_{i \rightarrow f}^{(st)} = B \cdot \rho(\omega), \quad \dot{P}_{f \rightarrow i}^{(st)} = C \cdot \rho(\omega), \quad (16.61)$$

выделив явно $\rho(\omega)$ – "спектрально-объёмная" плотность энергии электромагнитного излучения на частоте ω , т.е. число фотонов в единице объёма и единичном интервале частот. Пока мы не знаем, как соотносятся между собой коэффициенты B и C , но из самых общих соображений можем утверждать, что переходы с нижнего (i) уровня на верхний (f) возможны только с поглощением фотона – кванта энергии внешнего излучения (далее мы следуем не вполне строгому выводу в [6], лекция 24). Используя (16.35), (16.48), примем $F(t) \approx 1$ (гладкий спектр). Тогда получим

$$P_{i \rightarrow f} = \left(\frac{E_0}{\hbar} \right)^2 \cdot |d_{if}|^2 \cdot \frac{\sin^2 \frac{(\omega_f - \omega) \cdot t}{2}}{(\omega_f - \omega)^2}. \quad (16.62)$$

Плотность энергии в единице объёма в интервале частот $d\omega$ есть

$$\rho(\omega) = \frac{\bar{E}^2 + \bar{H}^2}{8\pi} = \frac{E_0^2}{8\pi}, \quad (16.63)$$

если излучение квазимонохроматическое ((16.30), (16.31), $F(t) \approx 1$). Фактически диапазон частот ω , в котором вероятность $P_{i \rightarrow f}$ заметно отлична от нуля, достаточно узкий: $\Delta\omega \sim \omega_f$, как следует из (16.62) (см. рис. 16.7). Полную вероятность перехода найдём, подставив E_0^2 из (16.63) и проинтегрировав (16.62) по частоте:

$$P_{i \rightarrow f}^{\text{total}} = \frac{8\pi}{\hbar^2} \cdot |d_{fi}|^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) \cdot \frac{\sin^2(\omega_f - \omega) \cdot t}{(\omega_f - \omega)^2} \cdot d\omega \approx \frac{8\pi}{\hbar^2} \cdot |d_{fi}|^2 \cdot \rho(\omega_f) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} \cdot dx \cdot \frac{t}{2}.$$

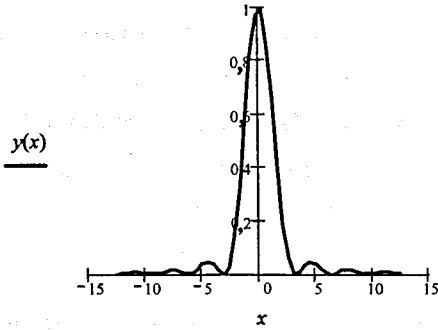


Рис. 16.7. График функции

$$y(x) = \left(\frac{\sin x}{x} \right)^2, \\ x = \frac{\omega - \omega_f}{2}$$

Поскольку

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} \cdot dx = \pi,$$

находим вероятность стимулированного перехода $i \rightarrow f$ в единицу времени:

$$\frac{dP_{i \rightarrow f}^{\text{total}}}{dt} = B \cdot \rho(\omega_f) = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \cdot |d_{fi}|^2 \cdot \rho(\omega_f). \quad (16.64)$$

Заметим, что вероятность $P_{i \rightarrow f}$ имеет размерность $[t^{-2}]$. Таким образом, мы получили

$$B = \frac{2\pi}{\hbar^2} \cdot |d_{fi}|^2. \quad (16.65)$$

Можно, конечно, сказать, что из (16.35) и всего рассмотрения, в котором получена эта формула, следует равенство коэффициентов B и C . Но отложим это утверждение до окончания данного анализа.

Если система, представляющая собой, для определённости, газ атомов, находится в динамическом равновесии с излучением, то:

- во-первых, число переходов $i \rightarrow f$ в единицу времени равно числу переходов обратных, $f \rightarrow i$, т. е.

$$\dot{N}_i = -\dot{N}_f, \\ \dot{N}_i = -N_i \cdot B \cdot \rho(\omega), \quad \dot{N}_f = -N_f(C \cdot \rho(\omega) + A), \quad (16.66)$$

где A — вероятность спонтанного (индекс sp) перехода $f \rightarrow i$ в единицу времени:

$$\dot{P}_{f \rightarrow i}^{(\text{sp})} = A; \quad (16.67)$$

- во-вторых, при температуре газа T число атомов в i -состоянии относится к числу атомов в f -состоянии, в соответствии с формулой Больцмана, как

$$\frac{N_f}{N_i} = e^{-(\epsilon_f - \epsilon_i)/T} = e^{-\hbar\omega_{fi}/T}. \quad (16.68)$$

Здесь, как и раньше, температура измеряется в единицах энергии (эВ).

- В-третьих, если принять, что газ атомов находится в тепловом равновесии со стенками объёма, в который он заключён, то плотность энергии излучения в объёме описывается формулой Планка (курс "Физика твёрдого тела"):

$$\rho(\omega) \equiv \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_{\text{photon}}^{(\omega)}}{d\omega} \cdot \hbar\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/T} - 1}. \quad (16.69)$$

Подставляя (16.68) и (16.69) в (16.66), после очевидных преобразований получим

$$\frac{\hbar\omega_f^3}{\pi^2 c^3} \cdot [B e^{\hbar\omega_f/T} + C] + A(e^{\hbar\omega_f/T} - 1) = 0.$$

Поскольку это равенство справедливо при любой температуре T , из него следует

$$A = -B \cdot \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} = C \cdot \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}, \quad \text{т. е. } B = -C.$$

Значение коэффициента B определено в (16.65). Окончательно получаем коэффициенты Эйнштейна:

$$A = \frac{4\omega^3}{\hbar c^3} \cdot |d_{fi}|^2, \quad B = C = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \cdot |d_{fi}|^2. \quad (16.70)$$

Обратим внимание на размерность коэффициентов A , B и C :

$$[A] = \frac{([\text{время}]^{-3} \cdot ([\text{заряд}] \cdot [\text{длина}])^2)}{([\text{энергия}] \cdot [\text{время}] \cdot ([\text{скорость}])^3)} = \frac{1}{[\text{время}]},$$

$$[B] = \left(\frac{[\text{заряд}] \cdot [\text{длина}]}{[\text{энергия}] \cdot [\text{время}]} \right)^2 = \frac{[\text{длина}]}{[\text{энергия}] \cdot ([\text{время}])^2}.$$

Таким образом, равенство коэффициентов B и C подтверждено и найдено значение коэффициента A , определяющего вероятность спонтанных переходов, т.е. *время жизни свободного атома* в возбуждённом состоянии f :

$$\tau_{fi} = A^{-1}. \quad (16.71)$$

(см. подробнее § 17.2).

Заметим, что приведённый вывод справедлив для направленного излучения. Если же *излучение изотропно* (газ атомов в полости), нужно усреднить $\langle \bar{E}_0 \rangle^2$ по направлениям ("*усреднение по поляризациям*"):

$$\langle \langle \bar{E}_0 \rangle^2 \rangle = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} (E_0 \cos \theta)^2 \cdot d\Omega = \frac{1}{3} E_0^2.$$

Этот результат следует подставить в (16.64), что даёт там множитель $1/3$.

Множитель $1/2$ перед интегралом возникает из-за равенства

$$|\bar{E}_0(\theta)| = |\bar{E}_0(\pi - \theta)| = E_0 \cdot |\cos \theta|.$$

§ 16.7. Усиление излучения в активной среде

Механизм усиления излучения непосредственно связан с физикой вынужденных переходов, рассмотренных в предыдущем параграфе. *Вынужденное излучение*, сопровождающее такие переходы, привязано к фазе внешнего излучения. Это следует из самого подхода теории возмущений, когда возмущение и вероятность перехода связаны соотношениями (16.24), (16.25). Если в поле внешнего излучения находится группа атомов (молекул), то все

возбуждённые атомы будут излучать не независимо, а *когерентно* (англ. *coherent* – согласованный, коллективный). Такая привязка по фазе проявляется особенно эффективно, когда частота внешнего поля совпадает с частотой излучения атомов (резонанс). На этом основано действие так называемых *квантовых генераторов* (мазеры, лазеры и др.). В действительности такой механизм генерации возможен и в классической системе, когда излучателями являются не атомные электроны, а, например, электроны в магнитном поле, движение которых описывается классически (в частности, *лазер на "свободных" электронах*).

Общая картина усиления излучения может быть представлена теперь следующим образом. Пусть среда состоит из атомов, способных совершать переходы с испусканием или поглощением излучения некоторой частоты ω , и пусть концентрация возбуждённых атомов n_f , способных испускать излучение, по каким-то причинам превышает концентрацию невозбуждённых поглощающих атомов n_i :

$$n_f > n_i.$$

Такая среда называется *активной*. Если сквозь активную среду проходит монохроматическая волна частоты ω , её интенсивность будет возрастать в результате того, что вклад вынужденного излучения возбуждённых атомов преобладает над потерями на поглощение. Если пренебречь для простоты всеми основными потерями, кроме резонансного поглощения, то уравнение для усиления плотности потока излучения можно найти, используя результаты предыдущего параграфа.

Изменение энергии излучения в объёме с активной средой найдём, воспользовавшись тем же уравнением баланса (16.66), считая числа N_f и N_i (их называют *заселённостью уровней* атомов среды) заданными. Соотношение между N_f и N_i отличается теперь от равновесного закона (16.68) и их значения определяются производительностью процесса, переводящего атомы из состояния i в состояние f (*накачка*). Тогда энергия излучения в объёме изменяется в соответствии с уравнением (убыль N_f соответствует излучению, т.е. росту \mathcal{E}_ω):

$$\frac{d\varepsilon_\omega}{dt} = -\hbar\omega \cdot \frac{dN_f}{dt} = \hbar\omega \cdot [B \cdot \rho(\omega) \cdot (N_f - N_i) + AN_f]. \quad (16.72)$$

Учтём, что полное число фотонов в объёме связано с энергией излучения в объёме V равенством

$$\varepsilon_0 = \int \rho(\omega) \cdot d\omega \cdot dV \approx \rho(\omega_f) \cdot \Delta\omega \cdot V,$$

где $\Delta\omega$ – полоса частот излучения вблизи ω_f .

Подставив последнее значение ε_0 в (16.72), найдём

$$\frac{d\rho(\omega_f)}{dt} \approx \frac{\hbar\omega_f}{\Delta\omega} \cdot [B \cdot \rho(\omega_f) \cdot (n_f - n_i) + A \cdot n_f], \quad \text{где } n_{f,i} = \frac{N_{f,i}}{V} \quad (16.73)$$

– плотность атомов в f - и i -состояниях. Минимальное значение $\Delta\omega$, как следует из классического соотношения неопределённостей, известного в электродинамике, порядка

$$\Delta\omega \sim \frac{\pi}{\Delta t} \geq \frac{\pi}{2\tau_f} = \frac{\pi}{2} \cdot A.$$

Однако в системе газ + излучение всегда присутствуют какие-либо эффекты, вызывающие *уширение полосы частот*, в которой набор атомов квазирезонансно взаимодействует с излучением. Таким эффектом является, например, тепловое движение атомов, приводящее к разбросу частот излучения/поглощения атомов (*эффект Доплера*):

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} \sim \frac{v_T}{c} \sim \sqrt{\frac{T}{Mc^2}},$$

где T, M – температура и масса атомов. Минимальное значение

$$\Delta\omega_{\min} = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{\tau_f}$$

достигается при $T \rightarrow 0$ и называется *естественной шириной линии*. Из уравнения (16.73) с учётом значений коэффициентов A, B (16.70) найдём

$$\rho(\omega_f, t) = (\rho(\omega_f, 0) + \rho_0) \cdot e^{Kt} - \rho_0, \quad (16.74)$$

$$\rho_0 = \frac{An_f}{B(n_f - n_i)} = \frac{\hbar\omega_f^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{n_f}{n_f - n_i},$$

$$K = \frac{\hbar\omega_f}{\Delta\omega} \cdot B \cdot (n_f - n_i) = \frac{4\pi^2 \omega_f}{\hbar \cdot \Delta\omega} \cdot |d_f|^2 \cdot (n_f - n_i).$$

Отсюда видно, что при $n_f > n_i$ ($K > 0$) излучение усиливается с характерным временем

$$\tau_\omega = K^{-1}. \quad (16.75)$$

В предельном случае $\Delta\omega = \pi A/2$ время усиления излучения τ_ω сокращается до значения

$$(\tau_\omega)_{\min} = \frac{\pi}{2\hbar\omega} \cdot \frac{A}{B} \cdot \frac{1}{n_f - n_i} = \frac{\omega^2}{2\pi c^3} \cdot \frac{1}{n_f - n_i} \quad (16.76)$$

и не зависит от d_f (т.е. свойств атома!). Заселённость уровней, при которой $n_f > n_i$, называется *инверсной*, т.е. "обратной" по отношению к равновесной (16.68). Поддерживать такую заселённость можно только искусственно, для чего существуют разные методы (см. следующий параграф). В термодинамическом равновесии заселённость уровней "естественная" (16.68), когда $n_f < n_i$ и коэффициент $K < 0$. При этом излучение в среде затухает с тем же характерным временем τ_ω (16.75).

При достаточно высокой плотности излучения $\rho(\omega)$ заселённости уровней выравниваются: $n_f \rightarrow n_i$, что следует из простого рассуждения. Действительно, излучение усиливается, пока $n_f > n_i$. Но при достаточно высоком коэффициенте усиления K накачка рано или поздно перестаёт справляться с убылью n_f , заселённость уровня f начинает уменьшаться, пока не достигнет значения $n_f = n_i$. Дальше усиление прекращается – уровень энергии излучения достигает *насыщения*. На этот эффект впервые указал С.И. Вавилов, который назвал его *просветлением среды*: при некотором, достаточно высоком, уровне энергии излучения прекращается рост поглощения излучения, среда становится более прозрачной. При этом уравнение (16.73) становится нелинейным, так как

коэффициент K зависит теперь от $\rho(\omega)$ (через значения n_f и n_i). Эффект просветления среды положил начало *нелинейной оптике*.

§ 16.8. Квантовые усилители и генераторы

Физика вынужденного излучения и его усиления активной средой лежит в основе принципов действия квантовых усилителей и генераторов – детищ второй половины XX в. Принято считать, что с их открытием физики опоздали лет на двадцать–тридцать. Представления о вынужденном излучении, как уже сказано, были развиты Эйнштейном и Дираком ещё в начале прошлого столетия, а резонатор оптических квантовых генераторов, представляющих собой не что иное, как интерферометр Фабри–Перо, известен с конца XIX в. И тем не менее появление квантовых генераторов датируется 1954 г., когда советские физики Н.Г. Басов и А.М. Прохоров и независимо американские – Дж. Гордон (*J.P. Gordon*), Г. Цайгер (*H.J. Zeiger*) и Ч. Таунс (*C.H. Townes*) продемонстрировали действие аммиачного лазера (СВЧ-генератор, $\lambda = 1,25$ см). Десять лет спустя это открытие было отмечено Нобелевской премией (Н.Г. Басов, А.М. Прохоров, Ч. Таунс).

Квантовые усилители называют также *мазерами* и *лазерами*. Первый термин образован начальными буквами слов Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation (усиление микроволн стимулированным испусканием излучения), а второй – аналогично, с заменой первого слова словом Light (свет). Интересно, что ещё в 1940 г. советский физик В.А. Фабрикант предложил использовать явление вынужденного излучения для усиления электромагнитного излучения.

Полвека, прошедшие со времени открытия квантовых генераторов, отмечены огромными успехами в развитии этой новой отрасли науки и техники. В первых квантовых усилителях СВЧ на парамагнитных кристаллах, созданных Н. Бломбергом (*N. Blombergen*, США) с сотрудниками в 1956 г., была реализована трёхуровневая схема, предложенная годом ранее Н.Г. Басовым и

А.М. Прохоровым. В 1958 г. А.М. Прохоров сформулировал идею об использовании открытых резонаторов, а в 1960 г. Т. Мейман (*T. Meiman*, США) построил первый лазер на монокристалле рубина. Газовый лазер был впервые продемонстрирован американскими физиками А. Джаваном (*A. Javan*), В. Беннетом (*W.R. Bennet*), Д. Эрриотом (*D.R. Herriott*) в 1961 г., а годом позже – полупроводниковый лазер (одновременно несколько групп исследователей). С развитием квантовых генераторов в физике и технике появились интенсивные источники когерентного и остронаправленного электромагнитного излучения и высокочувствительные усилители электромагнитных сигналов.

Механизм усиления излучения, как мы видели в предыдущем параграфе, требует создания инверсной заселённости в системе атомов, структура уровней которых допускает переходы на частоте данного излучения. Можно указать два варианта создания инверсии заселённости уровней:

- 1) $n_f > (n_i)_T > (n_f)_T$: заселённость верхнего уровня n_f увеличивают так, что она превосходит термодинамически равновесное значение $(n_i)_T$ заселённости нижнего уровня – "накачка";
- 2) $n_i < (n_f)_T < (n_i)_T$: заселённость нижнего уровня n_i уменьшают так, чтобы она стала меньше термодинамически равновесного значения верхнего уровня $(n_f)_T$ – "очистка".

Существуют несколько разных методов накачки и очистки: облучение среды более коротковолновым излучением; пропускание через среду электрического тока, электронного пучка; инициирование химических реакций в смеси газов; возбуждение вихрей и турбулентных течений в газе и др. Подробно эти методы рассматриваются в курсе "Квантовые генераторы".

Для осуществления *непрерывной генерации* необходимо кроме усиления излучения ввести каким-либо способом *положительную обратную связь*, т.е. вернуть обратно часть волнового потока, прошедшего сквозь активную среду и усиленного ею. Если коэффициент усиления – K , а коэффициент обратной связи – β , то интенсивности излучения на входе генератора (активной среды) J_1 , выходе J_2

и интенсивность внешнего, инициирующего генерацию, излучения J_0 связаны очевидными равенствами

$$J_2 = KJ_1, \quad J_1 = \beta J_2 + J_0,$$

отсюда

$$J_2 = \frac{K}{1 - \beta K} \cdot J_0.$$

При $\beta K \rightarrow 1$ величина J_2 неограниченно возрастает, что означает переход от режима усиления к режиму генерации. Поэтому равенство

$$\beta K = 1$$

и есть известное в радиотехнике *условие генерации*. Для создания обратной связи активную среду помещают в резонатор, конструкция которого зависит от длины волны излучения – объёмный резонатор СВЧ (мазеры) или открытый резонатор из двух зеркал (лазеры).

На этом мы закончим обсуждение принципов работы квантовых усилителей и генераторов, адресуя читателя к вышеупомянутому специальному курсу.

ГЛАВА 17. АТОМАРНЫЕ СПЕКТРЫ

§ 17.1. Линейчатый и сплошной спектры.

Метастабильные состояния

Свечение или люминесценция (лат. *luminescent* – свечение) различных физических объектов характеризуется, как известно, спектральным составом. Последний зависит от атомарного состава объекта, т.е. в конечном счёте от того, какие переходы разрешены в атомах, входящих в состав источника света. При переходе атомов между дискретными уровнями испускаются фотоны вполне определённой энергии, частоты и длины волны (о разбросе значений этих величин см. § 17.3). Это квазимонохроматическое излучение имеет *линейчатый*

спектр. Если же электрон возбуждаемого атома переходит на уровень с очень большим значением n в область, где расстояние между уровнями меньше их естественной ширины (см. § 17.3), линии спектра сливаются в *сплошной спектр*.

Особую роль в атомарных переходах играют *метастабильные состояния* (от греч. *metá* – между, около), переходы из которых в более низкие состояния с излучением одного фотона (электродипольные переходы) запрещены правилами отбора. В таких метастабильных состояниях атомы могут жить очень долго. Наиболее важный случай такой метастабильности – подуровень сверхтонкой структуры $1^2S_{1/2}$ ($F=1$) в атоме водорода (рис. 14.3), время жизни которого $\tau = 3,5 \cdot 10^{14} \approx 10^7$ лет, а разность энергий этих уровней соответствует длине волны излучения $\lambda = 21$ см.

Неоднократно упоминавшееся уже метастабильное состояние атома водорода $2^2S_{1/2}$ имеет время жизни $1/7$ секунды, и переход из этого состояния в основное ($1^2S_{1/2}$) происходит с испусканием двух фотонов, в результате чего суммарный переданный момент $\Delta \ell = 0$.

§ 17.2. Время жизни состояния

После того, как вероятность спонтанного перехода определена (см. (16.67)), остался один шаг до выяснения вопроса о времени жизни состояния. Обратимся к уравнению (16.66), положив в нём $B = C = 0$, что соответствует отсутствию внешнего излучения. Если в состоянии f находится $N_f(t)$ атомов, то изменение их числа со временем описывается очевидным в этом случае уравнением

$$\dot{N}_f = -AN_f,$$

откуда

$$N_f(t) = N_f(0) \cdot e^{-t/\tau_f},$$

где

$$\tau_{fi} = \frac{1}{A} = \frac{\hbar c^3}{4\omega^3} \cdot |d_{fi}|^{-2} \quad (17.1)$$

— время жизни состояния f по, строго говоря, электродипольному переходу $f \rightarrow i$.

Если ниже уровня f расположено несколько уровней, переходы на которые разрешены, полное время жизни уровня f , как легко сообразить, находится суммированием обратных значений парциальных времён:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\tau_{fi}} \quad (17.2)$$

Задача 17.1. Вычислить время жизни $2P$ -состояния водорода.

Спонтанные переходы с уровня $2P$ возможны только на уровень $1S$ (рис. 14.3). Энергия перехода $\hbar\omega_{21} = 10,2$ эВ. Воспользовавшись значениями $d(1S/2P)$, полученными в задачах 16.2 и 16.4, найдём

$$\tau_{2P \rightarrow 1S}^{-1} = \frac{4\omega_{21}^3}{\hbar c^3} \cdot (0,745e r_0)^2 = 4 \cdot \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \cdot \left(\frac{\hbar\omega_{21}}{\hbar c}\right)^3 \cdot c \cdot (0,745r_0)^2 = 1,88 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1},$$

т.е. $\tau_{2P \rightarrow 1S} \approx 0,53 \cdot 10^{-9}$ с.

§ 17.3. Ширина спектральных уровней и линий

Конечное значение времени жизни атома в возбуждённом состоянии приводит к тому, что энергия фотона, испущенного при переходе из этого состояния в основное, становится неопределённой. В соответствии с соотношением (5.4) эта неопределённость есть

$$\delta\varepsilon_0 \geq \frac{\hbar}{\tau}, \quad (17.3)$$

где τ — время жизни состояния. Соответственно, ширина спектральной линии перехода равна

$$\left(\frac{\delta\lambda}{\lambda}\right)_0 = \left(\frac{\delta\omega}{\omega}\right)_0 = \left(\frac{\delta\varepsilon_0}{\varepsilon}\right) = \frac{1}{\omega_{fi}\tau_{fi}}, \quad (17.4)$$

где τ_{fi} — парциальное время жизни по переходу $i \rightarrow f$. Характерные времена жизни состояний, определяющих излучение атомов в *оптическом диапазоне*, и частоты в этом диапазоне порядка (сравни задачу 17.1)

$$\tau_i \sim 10^{-8} - 10^{-9} \text{ с}, \quad \omega_{fi} = 2\pi \frac{c}{\lambda} \sim 2\pi \cdot 5 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1},$$

так что

$$\left(\frac{\delta\lambda}{\lambda}\right)_0 \sim 3 \cdot 10^{-8}.$$

Эта величина почти на порядок меньше разрешающей способности современных спектроскопических приборов.

Величина $(\delta\lambda/\lambda)_0$ называется *естественной шириной линии* излучения свободного атома. Она может значительно возрастать, если атом входит в состав сложной молекулы или кристалла — сказывается влияние окружающих атомов на время жизни состояния.

Атомы вещества участвуют в тепловом движении, что приводит, как уже сказано в § 16.7, к *доплеровскому сдвигу* частоты излучения отдельного атома, имеющего скорость v :

$$\left(\frac{\delta\omega_D}{\omega}\right)_D \sim \frac{v_T}{c}, \quad (17.5)$$

и *доплеровскому уширению* линии излучения ансамбля атомов

$$\left\langle \left(\frac{\delta\omega}{\omega}\right)_D \right\rangle \sim \frac{v_T}{c} \sim \sqrt{\frac{T}{Mc^2}}. \quad (17.6)$$

При комнатных температурах для атомов с атомным весом ~ 20 эта величина составляет около $2 \cdot 10^{-6}$, т.е. на два-три порядка превосходит естественную ширину линии.

ГЛАВА 18. АТОМ ВО ВНЕШНЕМ СТАТИЧЕСКОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

§ 18.1. Эффект Зеемана

В 1896 г. голландский физик П. Зееман (*P. Zeemann*) обнаружил, что в спектре излучения атома, помещённого в магнитное поле, спектральная линия расщепляется в мультиплет, структура которого зависит от величины и направления магнитного поля. В случае простого (или нормального) эффекта Зеемана спектральная линия расщепляется в спектрометре (рис. 18.1) на три линии при наблюдении поперёк поля и на две линии при наблюдении вдоль поля.

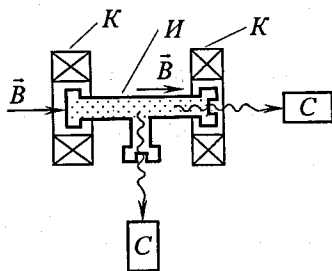


Рис. 18.1. Схема опыта по наблюдению эффекта Зеемана: *И* – источник (например, трубка с газовым разрядом); *К* – катушки, создающие магнитное поле \vec{B} ; *С* – спектрометры с анализом направления поляризации

Спектральные линии образовавшегося мультиплета (рис. 18.2) расщеплены на величину $\Delta\lambda$, пропорциональную полю. При наблюдении поперёк поля \vec{B} (рис. 18.2, б) образуются три спектральные линии (зеемановский триплет) и излучение в этих линиях поляризовано линейно. Центральную, поляризованную вдоль поля компоненту излучения принято называть π -компонентой, боковые – σ -компонентами. При наблюдении вдоль поля (рис. 18.2, в) линий две (дублет) и излучение поляризовано циркулярно.

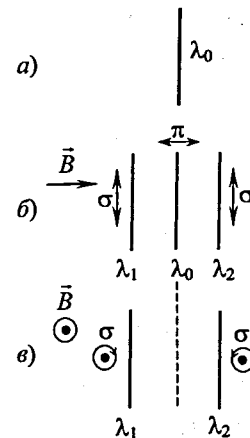


Рис. 18.2. Расщепление спектральных линий при простом эффекте Зеемана: *а* – поле отсутствует, *б* – наблюдение поперёк поля, *в* – наблюдение вдоль поля. π -компонента – излучение линейно поляризовано вдоль поля \vec{B} , σ -компоненты – излучение линейно поляризовано поперёк поля \vec{B} (случай б) или циркулярно поляризовано (случай в). λ – длина волны излучения в отсутствие поля (*а*) и при наблюдении поперёк поля (*б*), λ_1, λ_2 – длины воли излучения в присутствии поля. Стрелки показывают направление поляризации излучения

Эффект Зеемана немедленно следует из уравнения Паули (11.32) для частицы со спином в магнитном поле. Для анализа этого эффекта воспользуемся результатами § 14.3, но теперь внешнее поле \vec{B} считаем однородным на размере атома. В этом случае вектор-потенциал магнитного поля выберем в форме (11.33):

$$\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{B}, \vec{r}].$$

Подставив это выражение в (14.40), найдём, что слагаемое $(\nabla, \vec{A}(\vec{r}))$ по-прежнему равно нулю, т.к.

$$(\nabla, \vec{A}(\vec{r})) = \frac{1}{2} (\nabla, [\vec{B}, \vec{r}]) = -\frac{1}{2} (\vec{B}, [\nabla, \vec{r}]) = 0.$$

Второе слагаемое с вектором-потенциалом преобразуем аналогично (14.41):

$$2(\vec{A}, \nabla) = ([\vec{B}, \vec{r}], \nabla) = -(\vec{B}, [\vec{r}, \nabla]) = \frac{1}{i\hbar} \cdot (\vec{B}, \vec{L}).$$

В результате приходим к выражению для оператора возмущения

$$\hat{V}(\vec{r}) = \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \left(\left(\hat{L} + 2 \cdot \frac{g_e}{2} \cdot \hat{S} \right), \vec{B} \right), \quad (18.1)$$

что совпадает с (14.34) для электрона (заряд $-e$). Физический смысл этого выражения вполне понятен – это оператор энергии магнитного момента μ_{total} в магнитном поле B (сравни (14.34)):

$$\hat{U} = -(\hat{\mu}_{\text{total}}, \vec{B}), \quad \hat{\mu}_{\text{total}} = \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \left(\hat{L} + 2 \cdot \frac{g_e}{2} \cdot \hat{S} \right).$$

Очевидно, что это выражение не учитывает взаимодействия магнитного момента ядра с полем \vec{B} . В приближении $\mu_{\text{nucl}} \ll \mu_B$ ($\mu_{\text{nucl}} \leq 10^{-3} \cdot \mu_B$) вкладом этого взаимодействия можно пренебречь.

Выберем направление оси z вдоль вектора \vec{B} , заметив, что в данном случае этот выбор не произволен – это направление магнитного поля, которое здесь действительно является выделенным. Отсюда ясен физический смысл названия квантового числа m – магнитное квантовое число.

Поскольку \vec{B} теперь не содержит оператора, как это было в § 14.3, скалярное произведение в (18.1) вычисляется просто:

$$\left(\hat{L} + 2\hat{S}, \vec{B} \right) = \left(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z \right) \cdot B = \left(\hat{J}_z + \hat{S}_z \right) \cdot B, \quad \text{где } \hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z. \quad (18.2)$$

В случае многоэлектронного атома нужно, естественно, просуммировать по всем электронам. Тогда для случая LS -связи (§ 15.3) \hat{J} , \hat{S} в (18.2) просто заменяются суммарными значениями операторов отдельных электронов, т.е. операторами полного момента и полного спина атома.

Различают два случая эффекта Зеемана.

Простой (нормальный) эффект Зеемана имеет место, когда тонкая структура уровней отсутствует или их тонкое расщепление мало по сравнению с зеемановским расщеплением.

Сложный (аномальный) эффект Зеемана наблюдается, если тонкое (сверхтонкое) расщепление больше зеемановского расщепления уровней.

Названия "простой" ("нормальный") и "сложный" ("аномальный") появились исторически, по мере обнаружения и расшифровки первых зеемановских спектров.

1) *Простой эффект Зеемана*. Подставив оператор возмущения (18.1), (18.2) в (14.11), найдём значение сдвига энергии электрона, находящегося на n -м невырожденном уровне, в магнитном поле. Получим

$$\Delta \varepsilon = -\frac{e}{2m_e c} \left(\langle \hat{J}_z \rangle + \langle \hat{S}_z \rangle \right) \cdot B, \quad (18.3)$$

где $\langle \hat{S}_z \rangle$, $\langle \hat{J}_z \rangle$ – средние значения операторов \hat{S}_z и \hat{J}_z для атома в n -м состоянии:

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_z \rangle &= \langle n | \hat{S}_z | n \rangle, \\ \langle \hat{J}_z \rangle &= \hbar m_J. \end{aligned} \quad (18.4)$$

Из общих соображений можно утверждать, что суммарный спин атома устроен так, что

$$\langle \hat{S} \rangle = k \langle \hat{J} \rangle, \quad k = \text{const}. \quad (18.5)$$

Это следует из закона сохранения полного момента атома \vec{J} , если атом свободен (а мы и "начинаем" со свободного атома!). Найдём значение коэффициента k . Для этого запишем следующие равенства:

$$\left\langle \left(\hat{S}, \hat{J} \right) \right\rangle = k \left| \hat{J} \right|^2 = k \hbar^2 J(J+1). \quad (18.6)$$

Напомним, что большие буквы J, L, S без "шляпок" и "стрелок" обозначают соответствующие квантовые числа атома. Левую часть этого равенства преобразуем

$$\left\langle \left(\hat{S}, \hat{J} \right) \right\rangle = \left\langle \left(\hat{S}, \hat{L} + \hat{S} \right) \right\rangle = \left\langle \left(\hat{S}, \hat{L} \right) \right\rangle + \left\langle \left| \hat{S} \right|^2 \right\rangle.$$

Используя равенство (14.20), запишем

$$2 \left\langle \left(\hat{S}, \hat{L} \right) \right\rangle = \left\langle \left| \hat{J} \right|^2 \right\rangle - \left\langle \left| \hat{S} \right|^2 \right\rangle - \left\langle \left| \hat{L} \right|^2 \right\rangle.$$

В результате находим

$$\langle \hat{S}_z, \hat{J} \rangle = \frac{1}{2} \left[\langle \hat{J}^2 \rangle - \langle \hat{L}^2 \rangle + \langle \hat{S}^2 \rangle \right] = \frac{\hbar^2}{2} [J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)]. \quad (18.7)$$

Подставив (18.7) в (18.6), найдём

$$k = \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \quad (18.8)$$

Наконец, из (18.5) и (18.4) имеем

$$\langle \hat{S}_z \rangle = k \langle \hat{J}_z \rangle = k \cdot \hbar m_J. \quad (18.9)$$

Подставив (18.9) и (18.8) в (18.3), получим

$$\begin{aligned} \Delta \varepsilon_{\text{Zeemann}} &= \mu_B g_L m_J B, \\ g_L &= 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \end{aligned} \quad (18.10)$$

Коэффициент g_L называют *множителем Ланде* (A. Lande, 1921 г.).

Физический смысл сдвига $\Delta \varepsilon_{\text{Zeemann}}$ достаточно ясен — это энергия эффективного магнитного момента атома, прецессирующего в магнитном поле (§ 11.6 и рис. 11.4). В частности, для свободного покоящегося электрона ($L=0$, $J=S=1/2$) $g_L=2$ и $\Delta \varepsilon_{\text{Zeemann}} = \pm \mu_B B$ (сравни (11.44)).

Рассмотрим в качестве примера расщепление уровней $J=0$ и $J=1$ атома, помещённого в магнитное поле, и переходы между этими уровнями. Пусть для определённости это уровни 1^1S_0 и 2^1P_1 . Множители Ланде для обоих уровней равны 1 (табл. 18.1).

Таблица 18.1. Квантовые числа уровней 1^1S_0 и 2^1P_1

Уровень	J	L	S	g_L	m_J
1^1S_0	0	0	0	1	0
2^1P_1	1	1	0	1	$0, \pm 1$

В магнитном поле уровень 2^1P_1 расщепляется на три (рис. 18.3):

$$\Delta \varepsilon(2^1P_1) = 0, \pm \mu_B B. \quad (18.11)$$

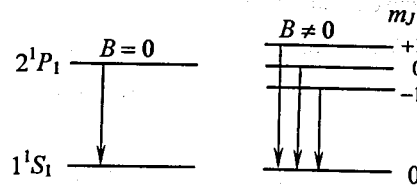


Рис. 18.3. Расщепление уровня 2^1P_1 в магнитном поле и возможные переходы в случае простого эффекта Зеемана

Соответственно, в спектре излучения вместо одной линии появляются три, длины волн которых отличаются на

$$\Delta \lambda_{\text{Zeemann}} = \lambda_0 \cdot \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_0},$$

где ε_0 и λ_0 — энергия и длина волны невозмущённого ($B=0$) перехода. Это соотношение удобно для оценок представить в виде

$$\begin{aligned} \Delta \lambda_{\text{Zeemann}} &= \lambda_0^2 g_L m_J k_Z B, \\ k_Z &= \frac{e}{4\pi m_e c^2} = 0,468 \text{ Тл}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}. \end{aligned} \quad (18.12)$$

Если в рассмотренном примере $\lambda_0 \sim 500 \text{ нм} = 5 \cdot 10^{-5} \text{ см}$ (оптический диапазон), то в поле $B=1 \text{ Тл}$ имеем

$$\Delta \varepsilon_{\text{Zeemann}} \approx 6 \cdot 10^{-5} \text{ эВ}, \quad \Delta \lambda_{\text{Zeemann}} \approx 0,01 \text{ нм} = 0,1 \text{ \AA}, \quad \Delta \lambda_{\text{Zeemann}} / \lambda \approx 2 \cdot 10^{-5},$$

что надёжно регистрируется современными спектрографами.

Поляризация излучения в случае простого эффекта Зеемана определяется квантовой природой процесса испускания излучения. Фотоны испускаются в переходах с изменением магнитного квантового числа (см. (16.50))

$$\Delta m_J = 0, \pm 1.$$

Соответственно, момент, уносимый фотоном в электродипольных переходах и равный ± 1 (спин фотона), может быть ориентирован вдоль оси z ($\Delta m_J = \pm 1$) или поперёк ($\Delta m_J = 0$). Тогда ясно, что при наблюдении вдоль вектора \vec{B} (ось z всегда направлена вдоль \vec{B} , т.к. это выделенное направление!) фотоны летят вдоль оси z . Стало быть, их спин параллелен оси z , и они "уносят" $\Delta m_J = \pm 1$. В этом случае переход с невозмущённого уровня $m_J = 0$ не наблюдается — линия λ_0 отсутствует.

Но фотоны, как мы уже говорили, "всегда" циркулярно поляризованы (см. § 11.1 и задачу 11.1, а также § 16.4). Поэтому при наблюдении вдоль поля (рис. 18.2, в) в спектре присутствуют две линии с право- и лево- циркулярно поляризованным излучением.

При наблюдении поперёк вектора \vec{B} фотоны уносят момент, направленный вдоль вектора \vec{k} , т.е. поперёк \vec{B} . Соответственно, $\Delta m_J = 0$ и в спектре присутствует несмещённая линия, а излучение линейно поляризовано. Испускание фотонов поперёк поля в переходах с $\Delta m_J = \pm 1$ объяснить так просто не удаётся. Здесь работает общее правило сложения моментов и, следовательно, изменение z-проекции результирующего момента (см. § 10.5 и соотношения (11.4)–(11.6)).

2) *Сложный эффект Зеемана* рассмотрим на примере перехода между уровнями $3^2P_{3/2}$, $3^2P_{1/2}$ и уровнем $3^2S_{1/2}$ в атоме натрия (см. также задачу 18.2 ниже). В отсутствие поля уровни $3P$ и $3S$ в натрии разнесены примерно на 2,1 эВ (влияние внутренних оболочек), и, кроме того, уровни $3^2P_{1/2}$ и $3^2P_{3/2}$ (тонкая структура) отличаются по энергии ещё на 2 мэВ (около 4 Å). В переходах между $3P$ -уровнями и уровнем $3S$ возникает известный "*жёлтый дублет*" Na (длины волн излучения 5895,9 Å). При наложении достаточно слабого магнитного поля, такого, что тонкое расщепление $\Delta \epsilon_{NJ}$ (14.25) превышает зеемановское,

$$\Delta \epsilon_{NJ} > \Delta \epsilon_{\text{Zeemann}}, \quad (18.13)$$

в спектре натрия возникает 10 (!) линий в соответствии с возможными переходами, показанными на рис. 18.4. Это и есть *сложный эффект Зеемана*.

Если увеличить поле до такого уровня, что зеемановское расщепление превзойдёт тонкое,

$$\Delta \epsilon_{\text{Zeemann}} > \Delta \epsilon_{NJ}, \quad (18.14)$$

и тонкое расщепление вновь будет "выключено", зеемановское расщепление вернётся к случаю простого – число линий вновь уменьшится. Это явление изменения характера зеемановского расщепления с ростом поля носит название *эффекта Пашена–Бака* (F. Paschen, E. Back, 1912 г.).

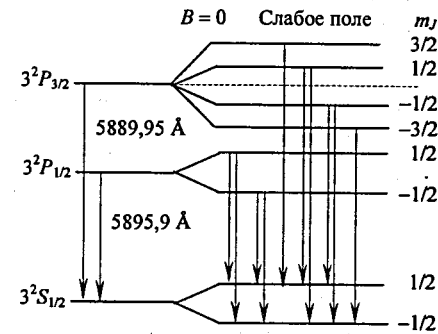


Рис. 18.4. Расщепление уровней $3P$, $3S$ атома Na и возможные переходы в случае сложного эффекта Зеемана

Задача 18.1. Оценить минимальное значение магнитного поля, в котором в атоме Na наблюдается эффект Пашена–Бака (переход $3P \rightarrow 3S$).

Выпишем значения квантовых чисел состояний $3P$, $3S$ (табл. 18.2). Для оценок возьмём наименьшее значение произведения $g_L |m_J|$. Это уровень $3^2P_{1/2}$, для которого $|g_L \cdot m_J| = 1/2$. Из (18.11) для $\Delta \epsilon_{NJ} = 2 \cdot 10^{-3}$ эВ ("жёлтый дублет" натрия) найдём

$$B = \frac{\Delta \epsilon_{NJ}}{\mu_B} \geq 10^6 \text{ Гс} = 100 \text{ Тл}.$$

Такие поля достигаются только в импульсных системах. В атомах с меньшим значением тонкого расщепления эффект наблюдается в статических магнитных полях ($B \sim 2 - 3$ Тл). В задаче 18.2 это показано на примере атома водорода – сверхтонкой структуры $1S$ -состояния. Заметим, что сделанная здесь упрощённая оценка "магнитного поля Пашена–Бака" даёт несколько завышенный результат.

Таблица 18.2. Квантовые числа состояний $3P$, $3S$

Уровень	J	L	S	g_L	m_J
$3^2S_{1/2}$	1/2	0	1/2	2	$\pm 1/2$
$3^2P_{1/2}$	1/2	1	1/2	2/3	$\pm 1/2$
$3^2P_{3/2}$	3/2	1	1/2	4/3	$\pm 3/2, \pm 1/2$

В простом эффекте Зеемана и в эффекте Пашена–Бака величина расщепления энергии уровня пропорциональна B , в сложном эффекте Зеемана эта зависимость более сложная (корень из суммы квадратов поля и некоторой константы, зависящей от квантовых чисел уровня – см. задачи 18.2, 18.3).

Задача 18.2. Найти значения энергии уровней основного ($1^2S_{1/2}$) состояния атома водорода в сильном магнитном поле.

Квантовые числа состояния $1^2S_{1/2}$ атома водорода имеют значения (§ 14.5 и рис. 14.5)

$$\ell = 0, j = s = 1/2, F = 0, 1.$$

Соответственно, оператор возмущения (18.1) имеет вид ($g_e \approx 2$)

$$\hat{V}^{(B)} = \frac{e \cdot B}{m_e c} \cdot \hat{S}_z. \quad (18.15)$$

Состояние $1S$ не имеет тонкой структуры ($\ell = 0$), но оно вырождено по сверхтонкому расщеплению: вообще говоря, в атоме водорода электрон в $1S$ -состоянии может пребывать на одном из двух подуровней, в зависимости от ориентации его спина (см. задачи 14.9 и 14.10). Поэтому волновые функции этих состояний следует записать в виде (см. (13.43))

$$\Psi_{1S}(\vec{r}, S_z, I_z) = \psi_{1S0}(\vec{r}) \cdot \chi(S_z, I_z), \quad \psi_{1S0}(\vec{r}) = \frac{e^{-r/r_0}}{\sqrt{\pi} \cdot r_0^{3/2}}. \quad (18.16)$$

Радиальная часть *матричных элементов* оператора \hat{V}_B одинакова, а функция $\psi_{1S0}(\vec{r})$ нормирована на единицу. Спиновую часть вычислим, учитывая, что мы имеем дело с *вырожденным состоянием*. Поэтому следует воспользоваться секулярным уравнением (14.14) и выражением (14.13) для матричных элементов. Подставляя в (14.13) оператор возмущения (18.15) и волновые функции (18.16), учтём, что радиальная часть последних — $\psi_{1S0}(\vec{r})$ — нормирована на единицу, а оператор (18.15) не зависит от \vec{r} . Поэтому матричные элементы этого оператора можно представить в виде

$$V_{pq}^{(B)} = \frac{eB}{m_e c} \cdot \langle \chi_p | \hat{S}_z | \chi_q \rangle,$$

где $p, q = 1, 2, 3, 4$ — номера уровней сверхтонкой структуры состояния $1S$ (задача 14.10). Для вычисления спиновой части этого выражения нам даже не нужно знать конкретного вида спиновых функций (полученных выше, в § 11.2). Достаточно вспомнить результаты задач 14.10, 14.11. В состояниях 1 и 3 (табл. 14.1) спин электрона направлен по (состояние 1) или против (состояние 3) выделенного направления, которым в данном случае объективно является вектор магнитного поля \vec{B} . В этих состояниях

$$\hat{S}_z \chi_{1,3} = \pm \frac{\hbar}{2} \cdot \chi_{1,3}.$$

Поэтому

$$V_{11}^{(B)} = \frac{eB\hbar}{2m_e c} \equiv \mu_B B, \quad V_{33}^{(B)} = -\mu_B B.$$

Несколько сложнее обстоит дело с состояниями 2 и 4, которые являются суперпозицией состояний с противоположно направленными спинами электрона и ядра (протона). Эта проблема обсуждалась уже в задаче 14.11. Здесь же остаётся "договориться", что в состоянии 2 спин электрона направлен по полю (его магнитный момент — против поля), а в состоянии 4 — наоборот. Такая "договорённость", как мы увидим чуть ниже, ничему не противоречит. В результате

$$V_{22}^{(B)} = \mu_B B, \quad V_{44}^{(B)} = -\mu_B B.$$

Теперь следует добавить эти элементы в матрицу (14.63) и записать секулярное уравнение

$$\begin{vmatrix} A + \mu_B B - \delta\varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A + \mu_B B - \delta\varepsilon & 0 & 2A \\ 0 & 0 & A - \mu_B B - \delta\varepsilon & 0 \\ 0 & 2A & 0 & -A - \mu_B B - \delta\varepsilon \end{vmatrix} = 0. \quad (18.17)$$

Раскрывая определитель, находим

$$(A + \mu_B B - \delta\varepsilon) \cdot (A - \mu_B B - \delta\varepsilon) \cdot [(A + \delta\varepsilon)^2 - (\mu_B B)^2 - 4A^2] = 0.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_{1,3}^{(B)} &= A \pm \mu_B B, \\ \delta\varepsilon_{2,4}^{(B)} &= -A \pm \sqrt{4A^2 + (\mu_B B)^2}, \quad A = \frac{8}{3} \cdot \frac{|\mu_e| \cdot \mu_p}{r_0^3} = 1,47 \text{ мкЭВ}. \end{aligned} \quad (18.18)$$

Как легко видеть, при $B \rightarrow 0$ мы приходим к структуре уровня $1^2S_{1/2}$ (14.61):

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_1(0) &= \delta\varepsilon_2(0) = \delta\varepsilon_3(0) = A, \\ \delta\varepsilon_4(0) &= -3A. \end{aligned}$$

В соответствии с этим и выбрана нумерация четырёх корней секулярного уравнения $\delta\varepsilon_p$ ($p = 1, 2, 3, 4$).

В сильном магнитном поле

$$B \gg B_0 \equiv \frac{A}{\mu_B} \approx 254 \text{ Гс}$$

эффект Зеемана в атоме водорода становится линейным по полю. Таким образом, на примере $1S$ -состояния атома водорода хорошо прослеживается, с ростом магнитного поля, переход от сложного к простому эффекту Зеемана (рис. 18.6). Как легко видеть, анализируя эффект Зеемана в атоме водорода, мы пренебрегли вкладом взаимодействия магнитного момента ядра с полем B : В случае атома водорода, где $\mu_p \sim 10^{-3} \mu_e$, это достаточно малый эффект. Иначе обстоит дело в позитронии (задача 18.3).

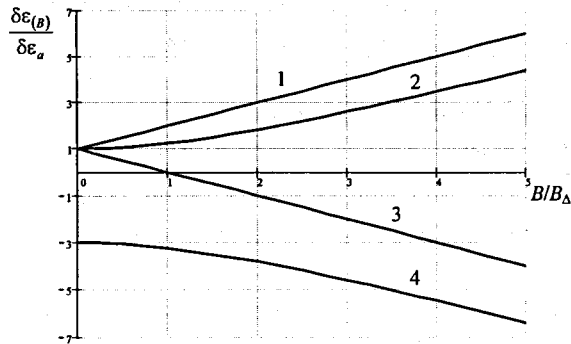


Рис. 18.6. Эффект Зеемана в атоме водорода. Состояние 1S

Задача 18.3. Найти значения уровней основного состояния позитрония в магнитном поле.

Позитроний (§ 14.6) имеет два состояния в зависимости от ориентации спинов, в которых суммарный магнитный момент равен (по модулю) $2\mu_B$ (p-Ps) или нулю (o-Ps) (табл. 14.3). После того, как мы распутали "хитрости" состояний 2 и 4 в 1S-состоянии атома водорода (задача 14.11), нам легче сделать то же самое и для позитрония.

Для позитрония оператор магнитного момента (§ 14.6) равен

$$\hat{\mu}_{Ps} \approx \frac{2\mu_B}{\hbar} \cdot (\hat{S}_{pos} - \hat{S}_e).$$

Отсюда оператор (18.15) для позитрония принимает вид

$$\hat{V}_{Ps}^{(B)} = \frac{eB}{m_e c} \cdot (\hat{S}_z^{(pos)} - \hat{S}_z^{(e)}).$$

Вычислим значения матричных элементов $\hat{V}_{pq}^{(B)}$, повторив рассуждения предыдущей задачи о возможности отделения радиальной части ψ -функции. Спиновые волновые функции даны в табл. 14.3. Получим, что из всех 16 матричных элементов $\hat{V}_{pq}^{(B)}$ только два — $\hat{V}_{24}^{(B)}$ и $\hat{V}_{42}^{(B)}$ — отличны от нуля:

$$\begin{aligned} V_{24}^{(B)} &= \frac{eB}{m_e c} \cdot \left\langle \chi_{pos}^+ \cdot \chi_e^- + \chi_{pos}^- \cdot \chi_e^+ \right\rangle \cdot (\hat{S}_z^{(pos)} - \hat{S}_z^{(e)}) \cdot \left\langle \chi_{pos}^+ \cdot \chi_e^- - \chi_{pos}^- \cdot \chi_e^+ \right\rangle = \\ &= \mu_B B \left\langle \chi_{pos}^+ \cdot \chi_e^- + \chi_{pos}^- \cdot \chi_e^+ \right\rangle \cdot \left\langle \chi_{pos}^+ \cdot \chi_e^- + \chi_{pos}^- \cdot \chi_e^+ + \chi_{pos}^+ \cdot \chi_e^- + \chi_{pos}^- \cdot \chi_e^+ \right\rangle = 2\mu_B B, \\ V_{42}^{(B)} &= \frac{eB}{m_e c} \cdot \left\langle \chi_{pos}^+ \cdot \chi_e^- - \chi_{pos}^- \cdot \chi_e^+ \right\rangle \cdot (\hat{S}_z^{(pos)} - \hat{S}_z^{(e)}) \cdot \left\langle \chi_{pos}^+ \cdot \chi_e^- + \chi_{pos}^- \cdot \chi_e^+ \right\rangle = 2\mu_B B. \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили, что позитроний как в парасостоянии (что очевидно), так и в ортосостоянии при $m = 0$ (что удивительно) ведёт себя как частица с магнитным моментом $2\mu_B$.

Теперь можно было бы записать секулярное уравнение, аналогичное (18.17), но нам неизвестны параметры A, B , описывающие сверхтонкую структуру позитрония. Для их вычисления воспользуемся тем же приёмом "нестроого решения", что и в задаче 14.10,^{*)} т.е. запишем секулярное уравнение в виде (сравни (18.17))

$$\begin{vmatrix} a - \delta\epsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a - \delta\epsilon & 0 & b + \Delta_B \\ 0 & 0 & a - \delta\epsilon & 0 \\ 0 & b + \Delta_B & 0 & c - \delta\epsilon \end{vmatrix} = 0,$$

где a, b, c — неизвестные пока параметры, а $\Delta_B = 2\mu_B B$. Раскрыв определитель, найдём

$$(a - \delta\epsilon)^2 \cdot ((a - \delta\epsilon) \cdot (c - \delta\epsilon) - (b + \Delta_B)^2) = 0.$$

Отсюда

$$\delta\epsilon_{1,3} = a, \quad \delta\epsilon_{2,4} = \frac{a+c}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a+c}{2}\right)^2 + (b + \Delta_B)^2}.$$

Очевидно, что $\delta\epsilon_{1,3} = \delta\epsilon_{Ps}|_{1S}$ — разность уровней сверхтонкой структуры 1S-состояния позитрония (14.65). Значения трёх остальных параметров найдём из асимптотики:

$$\begin{aligned} B \rightarrow 0 \quad \delta\epsilon_3 &\rightarrow \frac{a+c}{2} + \sqrt{\left(\frac{a+c}{2}\right)^2 + b^2} = \delta\epsilon_{Ps}|_{1S} = a, \\ \delta\epsilon_4 &\rightarrow \frac{a+c}{2} - \sqrt{\left(\frac{a+c}{2}\right)^2 + b^2} = 0. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\begin{aligned} a + c &= a, \\ \frac{(a+c)^2}{2} + b^2 &= \frac{a^2}{4}, \end{aligned}$$

что даёт

$$b = c = 0.$$

Окончательно получаем

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{1,3} &= a = \delta\epsilon_{Ps}|_{1S}, \\ \delta\epsilon_{2,4} &= \frac{a}{2} \pm \sqrt{\frac{a^2}{4} + (2\mu_B B)^2}. \end{aligned}$$

Второму выражению удобно придать безразмерную форму (рис. 18.7)

^{*)} Строгое решение читатель может найти в классической монографии [12], § 32, разд. 32.5.

$$\delta\epsilon_{2,4} = \delta\epsilon_{ps}|_{1S} \cdot \left(\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + x^2} \right),$$

$$x = \frac{B}{B_\Delta}, \quad B_\Delta = \frac{\delta\epsilon_{ps}|_{1S}}{4\mu_B} = 3,6289149 \text{ Тл.}$$

В малых магнитных полях, $B \ll B_\Delta$, отсюда следует

$$\delta\epsilon_{2,4} \approx \delta\epsilon_{ps}|_{1S} \cdot \left(\frac{1}{2} \pm \left(\frac{1}{2} + x^2 \right) \right),$$

т.е. линейный эффект Зеемана в позитронии отсутствует.

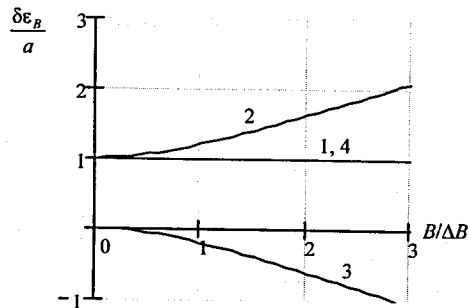


Рис. 18.7. Эффект Зеемана в позитронии. Состояние $1S$.
1, 3 – ортосостояния ($m = \pm 1$), 2 – ортосостояние ($m = 0$), 4 – парасостояние

§ 18.2. Эффект Штарка

Этот эффект является "электрическим аналогом" эффекта Зеемана: при наложении электрического поля на атом или молекулу происходит изменение структуры их уровней, в результате чего наблюдается расщепление спектральных линий (*J. Stark*, 1913 г.). Это расщепление вызвано взаимодействием с полем электрического дипольного момента атома d (собственного или наведённого этим электрическим полем), аналогично тому, как это описано в § 16.4. Отличие состоит в том, что теперь поле \vec{E} – статическое. Теория возмущений (§ 14.1) позволяет в данном случае рассчитать величину расщепления, если известны волновые функции состояний (см. задачу 14.1).

По порядку величины *штарковский сдвиг* энергии уровня (или *штарковское расщепление*) можно оценить как

$$\Delta\epsilon_{\text{Stark}} \sim d \cdot E \sim e r_0 \cdot E, \quad (18.19)$$

что для технически легко достижимого уровня поля $E \sim 10$ кВ/см составляет

$$\Delta\epsilon_{\text{Stark}} \sim e \cdot 10^{-8} \text{ см} \cdot 10^4 \text{ В/см} \sim 10^{-4} \text{ эВ},$$

т.е. величину того же порядка, что и зеемановский сдвиг в поле 1 Тл. Для высоких возмущённых состояний атома возможна даже ионизация атома (см. задачу 2.1).

Если атом не обладает дипольным моментом, в электрическом поле у него появляется наведённый дипольный момент

$$d = \alpha E, \quad \alpha = \text{const}. \quad (18.20)$$

Соответственно, штарковское расщепление в этом случае пропорционально квадрату поля:

$$\Delta\epsilon_{\text{Stark}} = \alpha \int_0^E E' \cdot dE' = \frac{\alpha E^2}{2}. \quad (18.21)$$

Задача 18.4. Оценить поляризуемость атома в модели Бора и штарковское расщепление в поле $E = 100$ кВ/см.

Подставив значение ν из (2.3) в уравнение (2.2) и учитывая равенство (2.4), найдём уравнения для возмущения x орбиты атомарного электрона при внесении атома во внешнее электрическое поле:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{e}_x x, \quad \vec{e}_x = \frac{\vec{E}}{|\vec{E}|},$$

$$m\ddot{x} + 3 \frac{n^2 \hbar^2}{m r_n^3} \frac{x}{r_n} = 2 \frac{Ze^2}{r_n^2} \frac{x}{r_n} + eE.$$

В статическом поле ($E(t) = \text{const}$) ускорение $\ddot{x} = 0$, отсюда

$$x = \frac{Er_n^3}{Ze}$$

Поскольку дипольный наведённый момент равен $d = ex$, из (18.20) найдём

$$\alpha = \frac{ex}{E} = \frac{r_n^3}{Z} = \frac{n^6}{Z^4} \cdot R_{\text{Bohr}}^3. \quad (18.22)$$

Поляризуемость атома определяется, в основном, смещением электронов, находящихся на внешней оболочке. Для водородоподобных атомов (18.22) найдём: $Z = 1$, $\alpha \sim n^6 \cdot 1,5 \cdot 10^{-25} \text{ см}^3$. Подставив это значение в (18.21), получим

$$\Delta \epsilon_{\text{Stark}} \sim \frac{n^6}{2} \cdot 1,5 \cdot 10^{-25} \cdot \left(\frac{10^5}{300} \right)^2 = 8,3 \cdot 10^{-21} \cdot n^6 \text{ (Г)} = 5,2 \cdot 10^{-9} \cdot n^6 \text{ эВ}.$$

Сильная зависимость от n означает, что квадратичный эффект Штарка заметен в тяжёлых атомах. Уже для натрия ($n = 3$) эта оценка даёт $\Delta \epsilon_s \sim 4 \cdot 10^{-5}$ эВ. Обратим внимание, что вначале здесь вычислено значение $\Delta \epsilon_{\text{Stark}}$ в гауссовой системе единиц (Г), затем произведён перевод в систему атомных единиц (эВ).

В водородоподобных атомах поляризуемость может быть рассчитана достаточно точно. В задаче 14.1 мы получили расщепление для атома водорода (уровни $2^2S_{1/2}$ и $2^2P_{1/2}$)

$$\epsilon_{\text{Stark}} = 3e r_0 E,$$

что совпадает с (18.19). Строго говоря, это решение справедливо при условии достаточно сильного электрического поля, когда штарковское расщепление превосходит разность энергий уровней тонкой структуры (а также лэмбовского сдвига)

$$\delta \epsilon_{\text{Stark}} > \delta \epsilon_{\text{st}}, \quad \delta \epsilon_{\text{Lamb}}. \quad (18.23)$$

Для уровня $n = 2$ атома водорода, рассчитанного в задаче 14.1, величина смещения $2S_0$ относительно уровня $2P_0$ составляет (рис. 14.3)

$$\delta \epsilon_{\text{Lamb}} = 4,37 \text{ мкэВ}.$$

Поэтому решение задачи 14.1 корректно, если

$$E > \frac{\delta \epsilon_{\text{Lamb}}}{3 \cdot e r_0} \approx \frac{4,37 \cdot 10^{-6}}{3 \cdot 0,53 \cdot 10^{-8}} \approx 300 \text{ В/см}.$$

§ 18.3. Магнитный резонанс

Прецессию магнитного момента частицы можно использовать для измерения её гиромангнитного отношения. Делается это с помощью так называемого метода *магнитного резонанса*. Исследуемый образец помещается в однородное магнитное поле, вызывающее прецессию магнитных моментов его молекул, атомов и ядер. Помимо этого на образец накладывается слабое вращающееся поперечное поле. Если частота вращения поля совпадает с частотой ларморовской прецессии (11.44) (резонанс), т.е. поперечное поле вращается

синхронно с магнитными моментами, оно переворачивает их. Условие резонанса достигается путём медленного изменения основного магнитного поля. Момент резонанса фиксируется по поглощению энергии генератора вращающегося магнитного поля, затрачиваемой на перемагничивание образца. Зная частоту прецессии, а также значение магнитного поля в резонансе, можно из (11.44) найти величину магнитного момента частицы μ и по нему — её гиромангнитного отношения.

Явление магнитного резонанса для электронных моментов в атомах и молекулах было открыто в 1944 г. советским физиком Завойским. Этот вид магнитного резонанса получил название ЭПР (*электронный парамагнитный резонанс*). На языке квантовой механики ЭПР есть не что иное, как "стимулирование" вынужденных переходов в атоме (молекуле), помещённом во внешнее магнитное поле, производящее расщепление атомных уровней атома на *зеemanовские подуровни* (18.10). Частота переходов

$$\omega_{\text{EPR}} = \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot d_L m_J B = g_L m_J \cdot \frac{eB}{2mc} \quad (18.24)$$

совпадает с частотой прецессии полного магнитного момента атома в магнитном поле B (11.44). Её значение позволяет найти величину множителя Ланде g_L , что даёт информацию о структуре электронной оболочки атома.

Типичные параметры установки для наблюдения ЭПР: $B \sim 10^4$ Э; $\Omega_{\text{пр}} \sim eB/m_e c \sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$ ($\lambda \sim 2 \text{ см}$). ЭПР широко применяется в исследовании химических реакций, так как он позволяет быстро анализировать химический состав вещества. Особенно существенна возможность наблюдения за так называемыми свободными радикалами, к которым из-за их высокой активности практически неприменимы обычные методы химического анализа.

В 1937 г. американский физик Раби использовал метод магнитного резонанса для измерения магнитных моментов ядер (ЯМР — *ядерный магнитный резонанс*) на атомных пучках. В 1940 г. этим же методом Блох (США) впервые измерил магнитный момент нейтрона, а в 1946 г. вместе с Парселлом распространил метод ЯМР на конденсированные среды. В отличие от ЭПР здесь частота прецессии меньше примерно в отношении массы электрона к массе

протона, и настолько же по порядку величины понижена чувствительность. При помощи ЯМР было впервые измерено гиромангнитное отношение для протона. В дальнейшем эта величина стала использоваться для прецизионных измерений магнитного поля методом ЯМР, относительная точность которых в настоящее время достигает $\sim 10^{-6}$.

Подобно спектрам ЭПР, спектры ЯМР применяются также для расшифровки молекулярной структуры химических соединений.

В физике твёрдого тела применяют также методы *ферромагнитного, антиферромагнитного и ферримангнитного резонансов*. Они аналогичны методам ЭПР и ЯМР, с тем отличием, что в данном случае резонансная частота определяется магнитным моментом *домена* соответствующего материала. Все три типа магнетиков – ферро-, антиферро- и ферримангнетики – обладают доменной структурой, строение которой и позволяет определить соответствующий из методов магнитного резонанса. Все рассмотренные методы исследования на основе магнитного резонанса относят к *радиоспектроскопии* вещества.

Измерение магнитного момента (гиромангнитного отношения) элементарных частиц является также одним из методов исследования их природы, поскольку гиромангнитное отношение сложной системы позволяет судить о её "устройстве". При этом обычно гиромангнитное отношение измеряется естественной единицей $g_0 = e/2m_0c$, соответствующей вращающейся частице массы m_0 (§ 11.3), что приводит к замене

$$G \rightarrow g \cdot g_0.$$

Так, например, собственному "вращению" электрона (спину) соответствует $g_e \approx -2$ (см. (11.24)). Знак минус связан с тем, что заряд электрона отрицательный.

Интересная ситуация имеет место для нейтрона, который электрически нейтрален, но обладает магнитным моментом с $g_n \approx -3,8$. (В данном случае $g_0 = e/m_n c$, где m_n – масса нейтрона). Знак минус снова показывает, что магнитный момент вызван вращением отрицательного заряда. Очевидно, что нейтрон представляет собой сложную систему, составленную по современным представлениям из так называемых кварков. Для протона $g_p \approx 5,6 = 2 + 3,6$, где

2 – гиромангнитное отношение, которое должен был бы иметь "точечный" протон (подобно электрону), а 3,6 – добавка, связанная со структурой протона. Интересно отметить, что эти добавки для протона и нейтрона близки по абсолютной величине, хотя разница между ними выходит далеко за пределы экспериментальных ошибок.

Такое свойство электрона, как близость $|g_e|$ к 2, позволяет с высокой точностью измерять значение g_e : частота прецессии спина электрона в магнитном поле совпадает с частотой ω_B его вращения по орбите (см. § 11.5)

$$|\Omega| = 2(\omega_L) = \frac{eB}{mc} \cdot \frac{g}{2}. \quad (18.25)$$

Для электрона (см. (11.24))

$$a \equiv \frac{g_e}{2} - 1 \ll 1, \quad \Omega_a \equiv a\omega_B \ll \Omega. \quad (18.26)$$

Вследствие этого угол между направлениями векторов скорости и спина электрона, вращающегося по круговой орбите в магнитном поле, медленно изменяется со временем, совершая полный оборот вокруг вектора \vec{B} за

$$N = \frac{\Omega_a}{\omega_B} = \frac{1}{a} \approx 10^3$$

оборотов электрона в магнитном поле. Частота Ω измеряется следующим образом. Поляризованные вдоль вектора скорости электроны, т.е. электроны, спин которых имеет преимущественное направление по скорости, впускаются в магнитное поле и после некоторого числа оборотов сбрасываются на мишень. В зависимости от ориентации спина при рассеянии на мишени возникает большая или меньшая аксиальная асимметрия, т.е. разность числа электронов, рассеянных налево и направо. Измеряя период этой зависимости $T_a = 2\pi/\Omega_a$, можно найти величину a . В экспериментах американских физиков Висли и Рича (1971 г.) удавалось наблюдать более 10^4 периодов медленной прецессии, что позволило измерить g_e с точностью $\sim 3 \cdot 10^{-9}$. Последние эксперименты, выполненные другим методом, дали значение $a_e = 11$. Полученный результат совпадает в пределах

ошибок с теоретическим значением. Это значит, что если электрон и имеет какую-либо структуру, то она "запрятана" очень "глубоко".

Аналогичные измерения делаются для μ -мезона, одной из самых загадочных частиц, которая ничем, кроме массы, не отличается от электрона ("тяжёлый электрон"). В начале 60-х гг. такие эксперименты проводились в ЦЕРН (Швейцария), а с начала 90-х гг. ведутся, уже на более высоком уровне точности, в Брукхейвенской национальной лаборатории (США). В них в начале этого века обнаружено (как будто бы) отличие экспериментального значения g_μ от теоретического, полученного на основе расчётов по так называемой Стандартной модели элементарных частиц. Последнее значение (март 2004 г.) составляет

$$g_\mu = 2 \cdot (1 + 0,001\,165\,9210(10)).$$

Обратим внимание на высочайшую точность этих измерений:

$$\frac{\Delta g_e}{g_e} \approx 2 \cdot 10^{-10}, \quad \frac{\Delta g_\mu}{g_\mu} \approx 1 \cdot 10^{-9}.$$

Похожие методы используются и для измерения магнитных моментов более "экзотических" частиц, например, Σ -гиперона, который живет всего около 10^{-10} с. Такие измерения производились, в частности, в 60-х г. группой Л.М. Баркова из Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН СССР на серпуховском протонном синхротроне Института физики высоких энергий. Для того чтобы повернуть магнитный момент на заметный угол за столь короткое время, использовалось сверхсильное магнитное поле $H \sim 10^6$ Гс, которое создавалось с помощью взрыва.

ГЛАВА 19. АТОМНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

В атомной и молекулярной физике и физике твёрдого тела начиная с конца XIX в. развиваются различные методы структурного анализа. Наиболее

известные и широко применяемые рассматриваются в этой главе. К ним относятся также методы *радиоспектроскопии* (магнитного резонанса, § 18.3).

19.1. Оптическая и рентгеновская спектроскопия

Излучение атомов в оптическом диапазоне – от инфракрасного (ИК) до ультрафиолетового (УФ) – позволяет изучать структуру молекулярных (ИК-диапазон) и атомарных (УФ-, видимое излучение) электронных оболочек. В атомах, как это следует из проведённых выше обсуждений, излучение УФ- и видимой частей спектра испускается в атомарных переходах лёгких атомов и верхних уровнях тяжёлых атомов. Полезно привести здесь характерные параметры оптических спектроскопических приборов (табл. 19.1). Все они являются взаимно дополняющими. Так, приборы типа призмного спектрографа, обладающие относительно невысокой *разрешающей способностью*

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}, \quad (19.1)$$

Таблица 19.1. Сравнительные характеристики спектроскопических приборов

Прибор	R	$G, \text{Å}$
Призмный спектрограф	$2 \cdot 10^4$	∞
Эшелон Майкельсона	$4 \cdot 10^5$	0,005
Дифракционная решётка	$1 \cdot 10^6$	1000
Интерферометр Майкельсона	$2 \cdot 10^6$	0,0005
Интерферометр Фабри–Перо	$5 \cdot 10^6$	0,0025

используются для просмотра широкой области спектра $\Delta\lambda$. Эту характеристику приборов принято описывать параметром, который называют *областью свободной дисперсии*

$$G \equiv \Delta\lambda. \quad (19.2)$$

Приборы высокого разрешения, как видно из табл. 19.1, имеют узкую область свободной дисперсии.

Разновидностью оптической спектроскопии является *лазерная спектроскопия*, в которой используется чрезвычайно высокая монохроматичность лазерного излучения. С его помощью возбуждают переходы с поглощением квантов между двумя исследуемыми уровнями (с нижележащего на вышележащий) с регистрацией последующих переходов с верхнего из двух уровней на какой-либо третий (ниже нижнего из двух исследуемых). Настройка системы на резонанс поглощения лазерного излучения позволяет точно определить разность энергий двух уровней. Рекордным достижением в этом методе является, по-видимому, измерение энергии двухфотонного перехода между основными $1^2S_{1/2}$ -уровнями и уровнями метастабильного $2^2S_{1/2}$ -состояния сверхтонкой структуры атомов водорода (рис. 14.3). Схематически этот эксперимент можно представить себе следующим образом (рис. 19.1): лазерный луч пропускается сквозь объём с газообразным водородом и после отражения от зеркала M возвращается в объём. Атомы, возбуждаемые лазерным излучением, находятся внутри резонатора C , настроенного на частоту $2S-2P$ -перехода. После перехода в короткоживущее $2P$ -состояние атомы высвечиваются и фотоны $2P-1S$ -перехода регистрируются детектором УФ-излучения ($\lambda_{2P-1S} \approx 0,1 \text{ мкм}$). Таким образом, регистрируется интегральный поток УФ-фотонов как функция частоты лазерного излучения. В такой схеме двухфотонного возбуждения доплеровское уширение, связанное с тепловым движением атомов, компенсировано в первом порядке, т.к. в системе атома, имеющего скорость v_T , значения энергии двух встречных фотонов сдвинуты противоположно относительно частоты лазерного излучения ω_L :

$$\begin{aligned} \omega'_{1,2} &= \gamma(1 \pm \beta) \cdot \omega_L, \quad \beta = \frac{v_T}{c}, \quad \gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}, \\ \omega'_1 + \omega'_2 &= 2\gamma\omega_L \cong 2\left(1 - \frac{\beta^2}{2}\right) \cdot \omega_L. \end{aligned} \quad (19.3)$$

Такую спектрометрическую схему называют "бездоплеровской" (Doppler-free).

В ней достигнуто рекордное разрешение

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} < 10^{-12}.$$

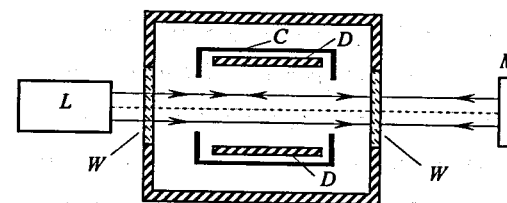


Рис. 19.1. Схема эксперимента по двухфотонной лазерной спектроскопии перехода $1S-2P$ в атоме водорода:

L – лазер; C – резонатор на частоту $2S-2P$ -перехода; $\Delta\nu = 9,92 \text{ ГГц}$;
 M – зеркало; D – детекторы УФ-излучения перехода $2P-1S$; W – кварцевые окна

Спектры излучения нижних уровней тяжёлых атомов лежат в области рентгеновского диапазона. Так, излучение атома урана ($Z = 92$) в переходах $2P-1S$ имеет энергию фотонов (см. (2.7), (15.5))

$$\epsilon_{2P-1S} \approx 86 \text{ кэВ}, \quad \lambda \approx 0,13 \text{ \AA},$$

т.е. относится к жёсткому рентгеновскому излучению.

Анализ такого (рентгеновского) излучения основан на его дифракции в кристаллах: при падении излучения на поверхность кристалла (отшлифованную параллельно одной из его главных плоскостей) имеет место отражение под углом, равным углу падения φ , если значение последнего удовлетворяет условию Вульфа-Брэгга (§ 3.3):

$$2d \cdot \sin \varphi = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (19.4)$$

Расстояния между узлами кристаллической решётки $d \sim 0,1 \text{ \AA}$, поэтому такой метод позволяет анализировать излучение в диапазоне

$$\lambda \geq 0,1 \text{ \AA}.$$

§ 19.2. Микроволновая спектроскопия. Атомный интерферометр

Метод микроволновой спектроскопии используется для измерения тонкой и сверхтонкой структуры атомов, переходы между уровнями которой (§§ 14.2–14.5) лежат в радиодиапазоне электромагнитного излучения – от дециметрового до субмиллиметрового. Принципиально схема спектроскопических измерений близка к обсуждавшейся в предыдущем параграфе схеме "бездоплеровской" лазерной спектрометрии. Атом каким-либо способом переводится в относительно долгоживущее состояние, а радиочастотное излучение возбуждает его переходы в короткоживущие состояния (задача 19.1). Регистрируя интенсивность излучения при "высвечивании" короткоживущих состояний в переходах на нижние уровни как функцию частоты возбуждающего излучения, получают резонансную кривую, максимум которой позволяет найти разность энергий уровней (задача 19.1 и рис. 19.1, 19.2 ниже). В водороде, например, в качестве такого долгоживущего состояния используют метастабильное 2S-состояние, относительно которого и измеряются сдвиги близлежащих уровней. Атом может забрасываться в это 2S-состояние безызлучательными переходами, например, в столкновениях с быстрыми электронами из электронной пушки. Подобные устройства получили название *атомный интерферометр*.

Одним из первых наиболее замечательных результатов микроволновой спектроскопии считается измерение *лэмбовского сдвига* (§ 14.4). Этим же методом было измерено значение сверхтонкого расщепления уровней основного состояния позитрония: $\Delta\nu \approx 203,4003$ ГГц, $\Delta\varepsilon_{HFS} \approx 8,41 \cdot 10^{-4}$ эВ.

Задача 19.1. При воздействии резонансного излучения на атом два его уровня образуют смешанное состояние (§ 16.2), а конечное время жизни в одном из этих состояний (или в обоих) приводит к тому, что атом, "высвечиваясь", переходит на один из ниже расположенных уровней.

Найти вероятность $P_2(t)$ пребывания атома в состоянии 2 (рис. 16.1), если времена жизни атома в состояниях 1 и 2 равны τ_1, τ_2 соответственно. Рассмотреть случай возмущения, частота которого ω близка к частоте перехода ω_0 , но необязательно с ней совпадает.

Запишем возмущение в виде, аналогичном (16.10):

$$\hat{V}(t) = V_0(\vec{r}) \cdot (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (19.5)$$

и будем искать волновую функцию возмущённой системы в виде (16.11). Матричные элементы (16.8) в данном случае имеют вид (сравни (16.12))

$$\begin{aligned} V_{11} &= V_{11}^0 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \\ V_{12} &= V_{12}^0 (e^{i\Delta\omega t} + e^{-i(\omega_0 + \omega)t}), \\ V_{21} &= V_{21}^0 (e^{i(\omega_0 + \omega)t} + e^{-i\Delta\omega t}), \\ V_{22} &= V_{22}^0 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \\ V_{mn}^0 &= \langle m | V_0 | n \rangle, \quad \Delta\omega = \omega - \omega_0. \end{aligned} \quad (19.6)$$

Случай бесконечно больших τ_1 и τ_2 рассмотрен в § 16.2. Теперь нужно учесть конечность этих параметров. Поэтому в уравнениях (16.13) добавим скорость убывания амплитуд:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_1}{dt} &= V_{11}a_1 + V_{12}a_2 - \gamma_1 a_1, \\ i\hbar \frac{da_2}{dt} &= V_{21}a_1 + V_{22}a_2 - \gamma_2 a_2. \end{aligned}$$

Здесь γ_1, γ_2 – постоянные, связанные со временем жизни атома в соответствующем состоянии равенствами

$$\gamma_{1,2} = \frac{1}{2\tau_{1,2}}. \quad (19.7)$$

Двойка в знаменателе появляется из-за того, что вероятность пребывания атома в состоянии n равна квадрату амплитуды:

$$P_n(t) = |a_n(t)|^2 = |a_n(0)|^2 \cdot e^{-2\gamma_n t} \equiv |a_n(0)|^2 \cdot e^{-t/\tau_n}.$$

Подставив сюда значения V_{mn} (19.6) и повторяя процедуру усреднения, проведённую в § 16.2, приходим к уравнениям, аналогичным (16.15):

$$\begin{aligned} \frac{da_1}{dt} &\approx -i\Omega_E a_2 \cdot e^{i\Delta\omega t} - \gamma_1 a_1, \\ \frac{da_2}{dt} &\approx -i\Omega_E^* a_1 \cdot e^{-i\Delta\omega t} - \gamma_2 a_2, \\ \Omega_E &\equiv \frac{V_{12}^0}{\hbar}, \quad \Delta\omega = \omega - \omega_0. \end{aligned} \quad (19.8)$$

Параметр Ω_E пропорционален напряжённости электрического поля электромагнитной волны, воздействующей на атом (см. (16.14)). Пример вычисления матричных элементов можно найти в задаче 14.1.

Решение системы (19.8) ищем в виде

$$a_1(t) = C_1 e^{\kappa t}, \quad a_2(t) = C_2 e^{\kappa t}. \quad (19.9)$$

Подстановка в (19.8) даёт систему линейных алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} \kappa_1 C_1 \cdot e^{\kappa_1 t} &= -i\Omega_E C_2 \cdot e^{\kappa_2 t + i\Delta\omega t} - \gamma_1 C_1 \cdot e^{\kappa_1 t}, \\ \kappa_2 C_2 \cdot e^{\kappa_2 t} &= -\Omega_E^* C_1 \cdot e^{\kappa_1 t - i\Delta\omega t} - \gamma_2 C_2 \cdot e^{\kappa_2 t}. \end{aligned} \quad (19.10)$$

Приравняв показатели экспонент (дабы исключить зависимость $C_{1,2}$ от времени), находим

$$\kappa_1 = \kappa_2 + i\Delta\omega. \quad (19.11)$$

Соответственно, уравнения (19.10) принимают вид

$$\begin{aligned} (\kappa_1 + \gamma_1) \cdot C_1 + i\Omega_E C_2 &= 0, \\ i\Omega_E^* C_1 + (\kappa_2 + \gamma_2) \cdot C_2 &= 0. \end{aligned} \quad (19.12)$$

Приравняв нулю определитель этой системы (условие нетривиальности её решения), получим после несложных преобразований

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \frac{i\Delta\omega - (\gamma_1 + \gamma_2)}{2} \pm \sqrt{\frac{(i\Delta\omega - (\gamma_1 + \gamma_2))^2}{4} - \Omega_E^2 + \gamma_1(i\Delta\omega - \gamma_2)} = \\ &= \frac{i\Delta\omega - (\gamma_1 + \gamma_2)}{2} \pm \frac{i}{2} \cdot \sqrt{[\Delta\omega + i(\gamma_1 - \gamma_2)]^2 + 4|\Omega_E|^2}. \end{aligned} \quad (19.13)$$

Ограничимся случаем больших значений времени жизни состояний 1, 2:

$$2 \cdot |\Omega_E| \gg |\gamma_2 - \gamma_1|. \quad (19.14)$$

Тогда приближённо

$$\kappa_{1,2}^{(1,2)} \approx \frac{i}{2} \cdot (\Delta\omega \pm \Omega) - \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \pm \frac{\Delta\omega \cdot (\gamma_1 - \gamma_2)}{2\Omega}, \quad (19.15)$$

где

$$\Omega \equiv \sqrt{(\Delta\omega)^2 + 4|\Omega_E|^2}.$$

Введя также обозначения

$$\gamma'_{1,2} = \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \pm \frac{\Delta\omega \cdot (\gamma_2 - \gamma_1)}{2\Omega}, \quad (19.16)$$

из (19.15) и (19.11) найдём значения всех четырёх чисел $\kappa_{1,2}^{(1,2)}$:

$$\begin{aligned} \kappa_1^{(1)} &= \frac{i}{2} \cdot (\Omega + \Delta\omega) - \gamma'_2, \\ \kappa_1^{(2)} &= -\frac{i}{2} \cdot (\Omega - \Delta\omega) - \gamma'_1, \\ \kappa_2^{(1)} &= \frac{i}{2} \cdot (\Omega - \Delta\omega) - \gamma'_2, \\ \kappa_2^{(2)} &= -\frac{i}{2} \cdot (\Omega + \Delta\omega) - \gamma'_1. \end{aligned} \quad (19.17)$$

Теперь можно записать выражение для волновой функции смешанного (возмущённого) состояния, подставив в (16.3) значения амплитуд (19.9):

$$\psi(t) = (a_1^{(1)}(t) + a_1^{(2)}(t)) \cdot \psi_1^0(\vec{r}, t) + (a_2^{(1)}(t) + a_2^{(2)}(t)) \cdot \psi_2^0(\vec{r}, t),$$

где $\psi_{1,2}^0(\vec{r}, t)$ – волновые функции невозмущённых (чистых) состояний 1 и 2 (см. § 16.2). Для нахождения коэффициентов $C_1^{(1,2)}$ и $C_2^{(1,2)}$ нужно использовать начальные условия.

Рассмотрим два случая: атом при $t = 0$ находился в состоянии 1 (случай I) или в состоянии 2 (случай II).

Случай I: в начальный момент атом находился в состоянии I. Тогда, очевидно,

$$\psi(0) = (a_1^{(1)}(0) + a_1^{(2)}(0)) \cdot \psi_1^0(0),$$

причём

$$|\psi(0)|^2 = |\psi_1^0(0)|^2 = 1.$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} |a_1^{(1)}(0) + a_1^{(2)}(0)| &= |C_1^{(1)} + C_1^{(2)}| = 1, \\ |a_2^{(1)}(0) + a_2^{(2)}(0)| &= |C_2^{(1)} + C_2^{(2)}| = 0. \end{aligned}$$

Коэффициенты $C_{1,2}^{(1,2)}$ должны, кроме того, удовлетворять уравнениям (19.12), откуда находим

$$C_2^{(1,2)} = i \frac{\kappa_1^{(1,2)} + \gamma_1}{\Omega_E} \cdot C_1^{(1,2)} \approx -\frac{\Delta\omega \pm \Omega}{2\Omega_E} \cdot C_1^{(1,2)}.$$

Предположим, что коэффициенты $C_{1,2}^{(1,2)}$ – действительные величины. Подставив эти соотношения в предыдущую систему уравнений, найдём

$$C_1^{(1,2)} = \frac{\Omega \mp \Delta\omega}{2\Omega}, \quad C_2^{(1,2)} = \mp \frac{\Omega_E}{\Omega},$$

что также подтверждает сделанное предположение.

Полученные значения $C_{1,2}^{(1,2)}$ и $\kappa_{1,2}^{(1,2)}$ дают значение волновой функции для случая I:

$$\begin{aligned} \psi^1(t) &= \frac{1}{2\Omega} \cdot \left[(\Omega - \Delta\omega) \cdot e^{(\Omega - \alpha)t/2} + (\Omega + \Delta\omega) \cdot e^{-(\Omega - \alpha)t/2} \right] \cdot e^{(i\Delta\omega - \gamma)t/2} \cdot \psi_1^0(\vec{r}, t) - \\ &- \frac{\Omega_E}{\Omega} \cdot \left[e^{(\Omega - \alpha)t/2} - e^{-(\Omega - \alpha)t/2} \right] \cdot e^{-(i\Delta\omega - \gamma)t/2} \cdot \psi_2^0(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (19.18)$$

где

$$\alpha = \frac{\Delta\omega}{\Omega} \cdot (\gamma_2 - \gamma_1), \quad \gamma = \gamma_1 + \gamma_2.$$

Наконец, вероятность обнаружить систему в состоянии 1 или 2 равна квадрату модуля функции при ψ_1^0 или ψ_2^0 соответственно:

$$\begin{aligned} P_1^1(t) &= \frac{1}{2} \cdot \left[\left(1 + \frac{\Delta\omega^2}{\Omega^2} \right) \cdot \text{ch}\alpha t + 2 \frac{\Delta\omega}{\Omega} \cdot \text{sh}\alpha t + \frac{4\Omega_E^2}{\Omega^2} \cdot \cos\Omega t \right] \cdot e^{-\gamma t}, \\ P_2^1(t) &= 2 \left(\frac{\Omega_E}{\Omega} \right)^2 \cdot (\text{ch}\alpha t - \cos\Omega t) \cdot e^{-\gamma t}. \end{aligned} \quad (19.19)$$

В точном резонансе эта функция осциллирует с частотой Ω_E , затухая экспоненциально с характерным временем γ^{-1} :

$$\begin{aligned} P_1^I(t) \Big|_{\Delta\omega=0} &= \frac{1}{2} \cdot (1 + \cos 2\Omega_E t) \cdot e^{-\gamma t}, \\ P_2^I(t) \Big|_{\Delta\omega=0} &= \frac{1}{2} \cdot (1 - \cos 2\Omega_E t) \cdot e^{-\gamma t} \end{aligned} \quad (19.20)$$

(сравни рис. 16.1). Отметим также, что при $E=0$ выражения (19.19) дают $P_1^I(t) = e^{-\gamma t}$, $P_2^I(t) = 0$, как и должно быть.

Случай II: при $t=0$ атом находится в состоянии 2. Аналогичные вычисления дают

$$\begin{aligned} \Psi^{\text{II}}(t) &= \frac{\Omega_E}{\Omega} \cdot \left(e^{i(\Omega-\alpha)t/2} - e^{-i(\Omega-\alpha)t/2} \right) \cdot e^{i(\Delta\omega-\gamma)t/2} \cdot \Psi_1^0(\vec{r}, t) + \\ &+ \frac{1}{2\Omega} \left[(\Omega + \Delta\omega) \cdot e^{i(\Omega-\alpha)t/2} + (\Omega - \Delta\omega) \cdot e^{-i(\Omega-\alpha)t/2} \right] \cdot e^{-i(\Delta\omega-\gamma)t/2} \cdot \Psi_2^0(\vec{r}, t), \quad (19.21) \\ P_2^{\text{II}}(t) &= \frac{1}{2\Omega^2} \cdot \left[\left(1 + \frac{\Delta\omega^2}{\Omega^2} \right) \cdot \text{ch}\alpha t + 2 \cdot \frac{\Delta\omega}{\Omega} \cdot \text{sh}\alpha t + \frac{4\Omega_E^2}{\Omega^2} \cdot \cos\Omega t \right] = P_1^I(t). \end{aligned}$$

В качестве примера рассмотрим эксперимент по измерению энергии перехода между уровнями $2^2S_{1/2}$ и $2^2P_{1/2}$ (лэмбовский сдвиг) в атоме водорода (рис. 14.5) под действием электромагнитного излучения. Частота этого перехода (§ 14.5) равна $\Delta\nu_{\text{Lamb}} = 1,057$ ГГц, что соответствует длине волны 28,38 см (дециметровый диапазон радиоволн). Поэтому в эксперименте направленный поток атомов водорода пропускается через СВЧ-резонатор, настроенный на частоту, близкую к $\omega_0 \approx 2\pi \cdot \Delta\nu_{\text{Lamb}}$. Атомы водорода до входа в резонатор возбуждаются электронной бомбардировкой, и те из них, которые "забрасываются" на уровень $2^2S_{1/2}$ ($F=1$), образуют в резонаторе смешанное состояние с вышележащим уровнем $2^2P_{1/2}$. Время жизни уровня $2^2S_{1/2}$ примерно $\tau_1 = 1/7$ с, а уровня $2^2P_{1/2}$ $\tau_2 \sim 1,5$ нс. Вероятность атому пройти сквозь резонатор (т.е. выйти из резонатора в состоянии $2^2S_{1/2}$ ($F=1$)) описывается функцией $P_1^I(t)$ в (19.19). В данном случае t в (19.19) есть время пролёта сквозь резонатор. Скорость (энергия) атомов должна быть достаточно высокой, иначе все они успеют "высветиться" в резонаторе даже при его настройке на частоту, далёкую от резонансной ω_0 . Выбирая время пролёта порядка

$$t \sim 6\tau_2 \sim 10T_0, \quad T_0 = \frac{2\pi}{\omega_0},$$

найдем, что для цилиндрического резонатора, настроенного на моду TM_{010} , при осевом его размере в 1 см необходимая скорость атомов составляет $1 \cdot 10^6$ м/с (энергия 6 кэВ). Регистрирующая система (детектор) должна обеспечить измерение числа УФ-фотонов ($\lambda \approx 124$ нм, рис. 14.5), испускаемых при переходе возбуждённых атомов из состояния $2^2P_{1/2}$ в основное состояние.

Отметим, что для этого приёмники детектора должны располагаться внутри резонатора или в его стенках должны быть сделаны окна, прозрачные для этого излучения. Число отсчётов детектора в единицу времени (скорость счёта) равно

$$\dot{N} = k\dot{N}_0 \cdot (1 - P_1^I(t)),$$

где $k < 1$ – эффективность детектора, \dot{N}_0 – число атомов водорода в состоянии $2^2S_{1/2}$, поступающих в детектор в единицу времени. На рис. 19.2 и 19.3 показаны зависимости скорости счёта детектора от параметров резонатора. Обратим внимание на острую зависимость ширины резонансной кривой от частоты электрического поля в резонаторе (рис. 19.3). Кривые рис. 19.2 и 19.3 рассчитаны для значения

$$\hbar\Omega_E = 3e r_0 E$$

(см. задачу 14.1). Вид кривой 1 на рис. 19.3 позволяет сделать вывод, что энергию лэмбовского сдвига при выбранных значениях параметров измерительного устройства можно определить не хуже чем

$$\frac{\delta E}{E} = \frac{\delta\omega}{\omega} \sim 1 \cdot 10^{-5}.$$

В экспериментах достигнута несколько лучшая точность.

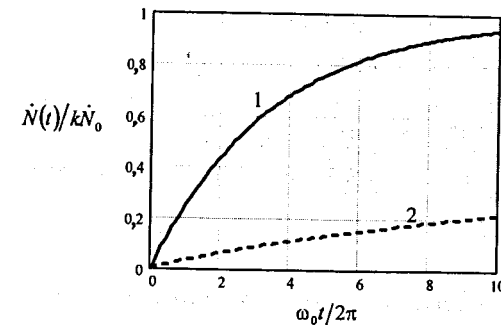


Рис. 19.2. Зависимость скорости счёта детектора от времени пролёта атомов через интерферометр. Частота поля резонатора отстроена от ω_0 на $\Delta\omega$: $\Delta\omega/\omega_0 = 2 \cdot 10^{-5}$ (кривая 1) и $2 \cdot 10^{-4}$ (кривая 2), напряжённость электрического поля в резонаторе $E = 10$ мВ/см ($\Omega_E = 2,4 \cdot 10^5$ эВ·см)

Необходимо отметить, что использование быстрых атомов в микроволновой спектроскопии может вносить систематические ошибки в точность результата. Это связано с эффектом Доплера (см. (19.3)). Действительно, если атомы водорода в рассматриваемом эксперименте имеют разброс по скоростям, т.е.

$$v = v_0 \pm \delta v,$$

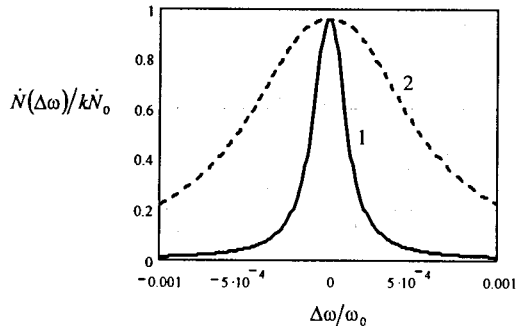


Рис. 19.3. Зависимость скорости счёта детектора от частоты поля резонатора в интерферометре. Напряжённость электрического поля в резонаторе $E_{[мВ/см]} = 10$ ($\Omega_F = 2,41 \cdot 10^5$ эВ·см, кривая 1) и 50 ($\Omega_F = 1,2 \cdot 10^6$ эВ·см, кривая 2), $\omega_0 t / 2\pi = 10$

резонансная кривая в частотах резонанса (лабораторная система) будет сдвинута на величину $\Delta\omega_{Lab}$ и уширена на величину $\delta\omega$:

$$\Delta\omega_{Lab} = \left(\frac{1}{\gamma} - 1\right) \cdot \omega_0 \approx -\frac{\beta^2}{2} \cdot \omega_0,$$

$$\delta\omega \approx \beta \cdot \Delta\beta \cdot \omega_0.$$

В нашем случае ($\beta_0 \approx 3 \cdot 10^{-3}$) это даёт $\Delta\omega_{Lab}/\omega_0 \approx -5 \cdot 10^{-6}$, $\delta\omega/\omega_0 \approx -1 \cdot 10^{-5} \cdot (\Delta v/v_0)$. Таким образом, нужно учесть сдвиг $\Delta\omega_{Lab}$ и обеспечить достаточно малый разброс атомов по скоростям $\Delta v/v_0 \leq 10^{-2}$.

Точность (разрешение) атомного интерферометра можно улучшить, усложнив его схему до *двойного атомного интерферометра*.

Принцип действия двойного интерферометра, предложенный в 50-х гг., состоит в использовании двух коротких "ударов" электромагнитного поля, разделённых интервалом $L = v_0 T$, где атом движется в свободном пространстве. В радиоспектроскопическом варианте двойного интерферометра эти удары производятся электромагнитными полями двух резонаторов (рис. 19.4), возбуждённых на одной и той же частоте ω .

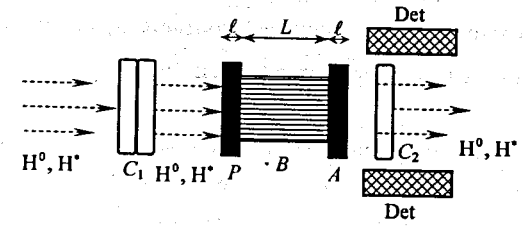


Рис. 19.4. Схема двойного атомного интерферометра: H^0, H^* – атомы водорода в основном и возбуждённых состояниях; P, A, C_1, C_2 – резонаторы очистки и анализа; l – длины резонаторов P и A ; L – длина свободного пространства (B); Det – детекторы УФ-излучения

Поясним принцип действия двойного атомного интерферометра на примере измерения энергии сверхтонкого расщепления состояния $2^2S_{1/2}$ атома водорода (рис. 14.5). Для измерения описанного перехода нужен поток атомов водорода в нижнем возбуждённом $2^2S_{1/2}$ ($F=0$) состоянии. Для его формирования можно использовать, например, тонкую мишень в виде газовой струи, в столкновениях с атомами которой атомы водорода переходят в возбуждённые состояния. Затем поток подвергается специальной очистке, для чего он пропускается через два резонатора C_1 , стимулирующие переходы из "ненужного" $2^2S_{1/2}$ ($F=1$) состояния в одно из состояний $2^2P_{1/2}$ (частоты 1147 и 1087 МГц) с последующими переходами на основной $1S$ -уровень. После такой очистки в пучке остаются преимущественно атомы в $2^2S_{1/2}$ ($F=0$) состоянии. Затем резонатор-"поляризатор" P инициирует переходы между исходным нижним $2^2S_{1/2}$ ($F=0$) и конечным верхним $2^2S_{1/2}$ ($F=1$) состояниями. Фаза волновой функции на выходе P зависит от длины резонатора l , частоты и амплитуды его поля. Пройдя свободный промежуток B ("база"), атом попадает во второй резонатор A ("анализатор"), где опять испытывает переходы между двумя состояниями. Атомы, покидающие интерферометр в "верхнем" состоянии, в дополнительном резонаторе C_2 переходят в $2P$ -состояние и высвечиваются, переходя в основное $1S$ -состояние. Фотоны УФ-излучения перехода $2^2S_{1/2}$ ($F=1$) $\rightarrow 2P$ регистрируются детекторами Det.

Вероятность обнаружить атом в верхнем состоянии на выходе из интерферометра можно получить, "сшивая" соответствующие волновые функции на стыках трех участков интерферометра (задача 19.2).

Задача 19.2. Найти вероятности обнаружения атома в нижнем (1) и верхнем (2) состояниях на выходе двойного атомного интерферометра. Рассмотреть простейший случай больших значений времени жизни τ_1, τ_2 ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0$, см. (19.7)), что справедливо для $2^2S_{1/2}$ -состояния.

Волновые функции атома имеют разный вид во всех трёх элементах интерферометра, и они непрерывны на стыках этих элементов, т.е. при $t = t_1, t_2$

$$t_1 = \tau = \frac{\ell}{v}, \quad t_2 = \tau + T, \quad T = \frac{L}{v}, \quad (19.22)$$

где ℓ — длины резонаторов P ("поляризатор") и A ("анализатор"), L — длина свободного промежутка B ("база" интерферометра), рис. 19.4. Если атом входит в резонатор P в нижнем состоянии 1, волновая функция на выходе резонатора имеет вид (19.18) при $\gamma = \alpha = 0$:

$$\begin{aligned} \psi_P^1(t_1) = & \frac{1}{2\Omega} \cdot [(\Omega - \Delta\omega) \cdot e^{i\Omega t/2} + (\Omega + \Delta\omega) \cdot e^{-i\Omega t/2}] \cdot e^{i\Delta\omega t/2} \cdot \psi_1^0(\vec{r}, \tau) - \\ & - \frac{\Omega_E}{\Omega} \cdot (e^{i\Omega t/2} - e^{-i\Omega t/2}) \cdot e^{-i\Delta\omega t/2} \cdot \psi_2^0(\vec{r}, \tau). \end{aligned} \quad (19.23)$$

При $\Delta\omega = 0$ это выражение совпадает с (16.19), где $\Omega_V \equiv \Omega_E$.

В свободном пространстве B атом находится в одном из двух чистых состояний с вероятностью, "предписываемой" значениями волновых функций

$$(\psi_B(\vec{r}, t))_{1,2} = B_{1,2} \cdot \psi_{1,2}^0(\vec{r}, t), \quad t_1 \leq t \leq t_2. \quad (19.24)$$

Из непрерывности волновых функций при $t = t_1$ следует равенство амплитуд при волновых функциях чистых состояний $\psi_{1,2}^0(\vec{r}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Omega} \cdot [(\Omega - \Delta\omega) \cdot e^{i\Omega t/2} + (\Omega + \Delta\omega) \cdot e^{-i\Omega t/2}] \cdot e^{i\Delta\omega t/2} &= B_1, \\ -\frac{\Omega_E}{\Omega} \cdot (e^{i\Omega t/2} - e^{-i\Omega t/2}) \cdot e^{-i\Delta\omega t/2} &= B_2. \end{aligned} \quad (19.25)$$

В резонаторе A атом опять переходит в смешанное состояние, волновая функция которого имеет тот же вид, что и в задаче 19.1:

$$\psi_A(t) = (a_1^{(1)}(t) + a_1^{(2)}(t)) \cdot \psi_1^0(\vec{r}, t) + (a_2^{(1)}(t) + a_2^{(2)}(t)) \cdot \psi_2^0(\vec{r}, t). \quad (19.26)$$

Поскольку в рассматриваемом случае $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$, корни характеристического уравнения $\kappa_{1,2}^{(1,2)}$ в (19.17) имеют значения

$$\begin{aligned} \kappa_1^{(1)} &= \frac{i}{2} \cdot (\Omega + \Delta\omega) = -\kappa_2^{(2)}, \\ \kappa_1^{(2)} &= -\frac{i}{2} \cdot (\Omega - \Delta\omega) = -\kappa_2^{(1)}. \end{aligned} \quad (19.27)$$

Соответственно, амплитуды $a_{1,2}^{(1,2)}(t)$ описываются формулами (19.9), где числа $\kappa_{1,2}^{(1,2)}$ имеют значения (19.27). Подставляя эти значения, например, в первое из уравнений (19.12) при $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$, приходим к соотношениям между коэффициентами $C_{\#}^{(n)}$:

$$\begin{aligned} C_2^{(1)} &= -\frac{\Omega + \Delta\omega}{2\Omega_E} \cdot C_1^{(1)}, \\ C_1^{(2)} &= \frac{\Omega - \Delta\omega}{2\Omega_E} \cdot C_1^{(2)}. \end{aligned} \quad (19.28)$$

В результате, в (19.26) остаются две независимые константы $C_1^{(1,2)}$:

$$\begin{aligned} \psi_A(t) = & (C_1^{(1)} \cdot e^{i(\Omega + \Delta\omega)t/2} + C_1^{(2)} \cdot e^{-i(\Omega - \Delta\omega)t/2}) \cdot \psi_1^0(\vec{r}, t) - \\ & - \frac{1}{2\Omega_E} \cdot [(\Omega + \Delta\omega) \cdot C_1^{(1)} \cdot e^{i(\Omega - \Delta\omega)t/2} - (\Omega - \Delta\omega) \cdot C_1^{(2)} \cdot e^{-i(\Omega + \Delta\omega)t/2}] \cdot \psi_2^0(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (19.29)$$

$$\tau + T \leq t \leq 2\tau + T.$$

На входе в резонатор A можно записать условие непрерывности волновых функций:

$$\begin{aligned} B_1 &= C_1^{(1)} \cdot e^{i(\Omega + \Delta\omega)\tau/2} + C_1^{(2)} \cdot e^{-i(\Omega - \Delta\omega)\tau/2}, \\ B_2 &= \frac{1}{2\Omega_E} \cdot [-(\Omega + \Delta\omega) \cdot C_1^{(1)} \cdot e^{i(\Omega - \Delta\omega)\tau/2} + (\Omega - \Delta\omega) \cdot C_1^{(2)} \cdot e^{-i(\Omega + \Delta\omega)\tau/2}], \\ t_2 &= 2\tau + T. \end{aligned}$$

Отсюда выразим $C_{1,2}^{(1,2)}$ через B_1, B_2 , куда подставим значения последних из (19.25). При этом учтём значение Ω^2 (19.15), что позволяет упростить выражения. В результате получим

$$\begin{aligned} C_1^{(1)} &= \frac{e^{-i\Omega T/2}}{4\Omega^2} \cdot \left\{ (\Omega - \Delta\omega)^2 \cdot e^{-\delta} + 4\Omega_E^2 \cdot (-2i \cdot \sin \delta \cdot e^{-i\Omega \tau} + e^{\delta}) \right\}, \\ C_1^{(2)} &= \frac{e^{i\Omega T/2}}{4\Omega^2} \cdot \left\{ (\Omega + \Delta\omega)^2 \cdot e^{-\delta} + 4\Omega_E^2 \cdot (-2i \cdot \sin \delta \cdot e^{i\Omega \tau} + e^{\delta}) \right\}, \\ \delta &\equiv \frac{\Delta\omega \cdot T}{2}. \end{aligned}$$

Подставив эти выражения в (19.9) с учётом соотношений между коэффициентами $C_2^{(1)}, C_2^{(2)}$ и $C_1^{(1)}, C_1^{(2)}$ (19.28) и значений $\kappa_{1,2}^{(1,2)}$ (19.27), приходим к выражениям для амплитуд $a_{1,2}^{(1,2)}$ при $\psi^0(\vec{r}, t)$ (заметим, что гораздо проще получить выражение для $a_2^{(1)} + a_2^{(2)}$, чем для $a_1^{(1)} + a_1^{(2)}$). Вероятность обнаружить атом в состоянии 2 на выходе из интерферометра, соответственно, есть

$$P_2^1(t_3) = |a_2^{(1)}(t_2) + a_2^{(2)}(t_2)| = |C_2^{(1)} \cdot e^{i(\Omega - \Delta\omega)t_2} + C_2^{(2)} \cdot e^{-i(\Omega + \Delta\omega)t_2}|,$$

$$t_3 = 2\tau + T.$$

Окончательно

$$P_2^1(\Delta\omega, t_3) = \left(\frac{4\Omega_E}{\Omega} \cdot \sin \frac{\Omega\tau}{2} \right)^2 \cdot \left(\cos \frac{\Omega\tau}{2} \cdot \cos \frac{\Delta\omega \cdot T}{2} - \frac{\Delta\omega}{\Omega} \cdot \sin \frac{\Omega\tau}{2} \cdot \sin \frac{\Delta\omega \cdot T}{2} \right)^2, \quad (19.30)$$

$$P_1^1(\Delta\omega, t_3) = 1 - P_2^1(t_2).$$

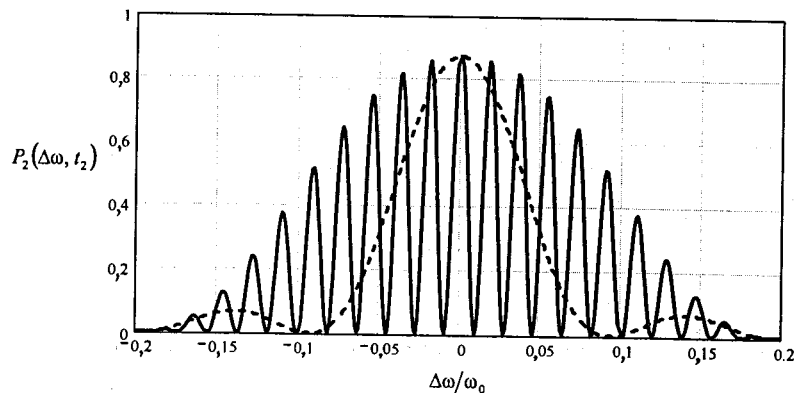


Рис. 19.5. Вероятность обнаружить атом на выходе интерферометра в верхнем из двух возможных состояний. Параметры: $\omega_0 = 2\pi \cdot 9,86$ ГГц, $\Omega_E = 1,2 \cdot 10^9$ эВ·см, $T = 10\tau = 5$ нс (сплошная линия) и $T = 0$, $\tau = 0,5$ нс (пунктирная линия)

Вид функции $P_2^1(t)$ (рис. 19.5, сплошная линия) аналогичен зависимости интенсивности сигнала $I(x)$ от базы x в двухлучевом оптическом интерферометре (например, в интерферометре Майкельсона). Если же "база" отсутствует ($T = 0$), функция $P_2^1(t)$ принимает вид $I(x)$ для дифракции Фраунгофера электромагнитной волны на щели. В этом случае функция $P_2^1(\Delta\omega, t_2)$ совпадает с (19.19) при $\alpha = \gamma = 0$ (рис. 19.5, пунктирная линия):

$$P_2^1(\Delta\omega, t_3) \Big|_{T=0} = \frac{2\Omega_E^2}{4\Omega_E^2 + \Delta\omega^2} \cdot (1 - \cos \Omega t_2), \quad t_3 = 2\tau. \quad (19.31)$$

Результат, полученный в задаче 19.2, позволяет оценить разрешающую способность двойного атомного интерферометра. При $\Delta\omega = 0$ имеем

$$P_2^1(\Delta\omega = 0, t_2) = \sin^2 2\Omega_E \tau,$$

так что в этой точке функция $P_2(\Delta\omega, t_2)$ может обращаться и в нуль. Очевидно, следует выбрать величину Ω_E так, чтобы при $\Delta\omega = 0$ находился максимум функции, т.е.

$$\Omega_E \tau = (2n + 1) \cdot \frac{\pi}{4}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (19.32)$$

Ширину этого максимума $2 \cdot \delta\omega$ — так называемую *ширину на полувысоте*^{*)} — оценить довольно просто, если

$$\delta\omega \ll 2\Omega_E. \quad (19.33)$$

Тогда

$$P_2^1(\delta\omega, t_2) \approx \cos^2 \frac{\delta\omega \cdot T}{2} = \frac{1}{2},$$

откуда

$$\delta\omega = \frac{\pi}{2T}. \quad (19.34)$$

Легко понять, что точность определения положения максимума ($\Delta\omega = 0$) примерно равна $\delta\omega$.

Для *простого интерферометра* (единичный резонатор) разрешающую способность можно найти аналогично, воспользовавшись (19.31) и приняв условие (19.33). Тогда

$$P_2^1(\delta\omega, t) \Big|_{T=0} \approx \frac{1 - \cos(\Omega(\delta\omega) \cdot t)}{2}, \quad (19.35)$$

$$\Omega(\delta\omega) \approx 2\Omega_E + \frac{\delta\omega^2 \cdot t}{4\Omega_E}.$$

Выбрав время пролёта атома через резонатор t и поле в резонаторе (параметр Ω_E) такими, что функция (19.35) имеет максимум при $\Delta\omega = 0$, т.е.

$$\Omega_E t = (2n + 1) \cdot \pi, \quad (19.36)$$

найдем $\delta\omega$ из уравнения

^{*)} В литературе эту величину принято обозначать сокращённо FWHM — Full Width at Half Maximum (англ.); в отечественной литературе употребляют также не вполне корректный термин "полуширина", имея в виду тот же параметр.

$$P_2^1(\delta\omega, t) = \frac{1}{2}, \text{ или } \cos(\Omega(\delta\omega) \cdot t) = 0.$$

Отсюда

$$\Omega(\delta\omega) \cdot t = (2n+1)\pi + \frac{\pi}{2},$$

что с учётом условия (19.33) даёт

$$\delta\omega \approx \sqrt{\frac{2\pi\Omega_E}{t}}.$$

Подставив сюда Ω_E из (19.36), окончательно получим

$$\delta\omega = \frac{\sqrt{2(2n+1)\pi}}{t} \geq \frac{\sqrt{2\pi}}{t}. \quad (19.37)$$

Таким образом, наилучшее ($n=0$) разрешение простого интерферометра совпадает с разрешением двойного атомного интерферометра при условии

$$t = 2\sqrt{2T}, \quad (19.38)$$

что далеко не всегда удаётся выполнить в эксперименте. В частности, для параметров эксперимента по измерению лэмбовского сдвига, рассмотренного выше, разрешение $\delta\omega/\omega_0 \sim 10^{-5}$ достигается при времени пролёта $t \sim 1$ нс, что требует довольно высокой скорости атомов водорода или малой длины резонатора.

§ 19.3. Атомная спектроскопия в статических полях

В атомной спектроскопии находят применение также спектрометры со статическими полями – электрическими или магнитными.

Вариант *атомного интерферометра со статическим электрическим полем* был успешно использован в экспериментах с быстрыми атомами водорода (энергия около 20 кэВ), имевших целью измерение лэмбовского сдвига $2P$ -состояния (§ 14.4). В эксперименте измерялась частота $\Delta\nu_{SP}$ перехода $2^2S_{1/2}$ ($F=0$) \rightarrow $2^2P_{1/2}$ ($F=1$), а известные из независимых экспериментов значения частот всех переходов между $2S$ - и $2P$ -уровнями позволяют найти лэмбовский сдвиг (см. рис. 14.5):

$$\Delta\nu_{\text{Lamb}} = \Delta\nu_{SP} + \frac{4}{3}\Delta\nu_2. \quad (19.39)$$

В этом варианте интерферометр отличается от описанного в § 19.3 тем, что переменное электромагнитное поле резонаторов заменено на статическое поле двух пар диафрагм (см. рис. 19.6) и исследуемые состояния смешиваются благодаря *эффекту Штарка*.

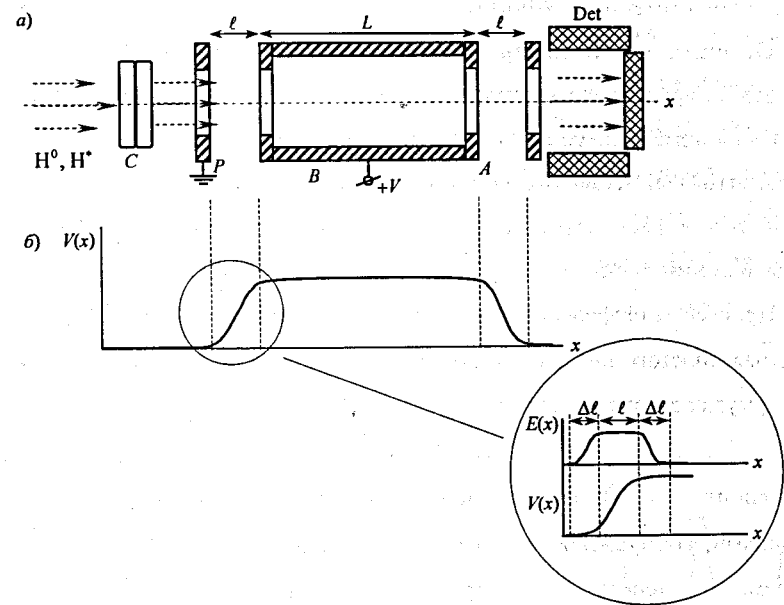


Рис. 19.6. Схема двойного атомного интерферометра с электростатическим полем (а), распределение потенциала вдоль его оси (б). С – резонаторы очистки; P, A – участки "поляризации" и "анализа" с продольным электрическим полем, на которых образуются смешанные состояния исследуемого атома; B – участок постоянного потенциала ("база"); Det – детекторы УФ-излучения

Отметим, что электростатическое поле между диафрагмами должно нарастать достаточно быстро, дабы обеспечить "мгновенный" (неадиабатический – см. § 7.3) переход чистых состояний в смешанное. Критерий неадиабатичности, очевидно, есть

$$\omega_0 \cdot \frac{\Delta \ell}{v_0} \ll 1,$$

где $\Delta \ell$ – протяжённость областей неоднородного электрического поля на входе и выходе участков между диафрагмами. В простейшем варианте такой интерферометр состоит из диафрагмы и цилиндра с диафрагмой на входе (участки $C - P - B$ на рис. 19.6), т.е. имеет только "поляризатор" и "базу", на которой располагаются детекторы УФ-излучения.

Отметим, что в электростатическом интерферометре предпочтительнее использовать продольное электрическое поле, т.к. поперечное электрическое поле создаёт в системе движущегося атома поперечное магнитное поле, а оно, в свою очередь, вызывает зеемановское расщепление уровней. При работе с быстрыми атомами этот эффект становится заметным и может приводить к дополнительным систематическим ошибкам.

Процесс интерференции состояний описывается формулами (19.19)–(19.21) для случая простого интерферометра и (19.30), (19.31) – для двойного. Теперь в этих формулах следует положить

$$\omega = 0, \quad \Delta \omega = -\omega_0. \quad (19.40)$$

По-прежнему ω_0 – частота перехода между двумя интерферирующими состояниями, формула для Ω_E имеет тот же вид, что и в (19.8), с тем лишь отличием, что теперь E – напряжённость электростатического поля. Тогда выражения (19.19) принимают вид

$$P_1^I(t) = \frac{1}{2} \cdot \left[\left(1 + \frac{\omega_0^2}{\Omega_{st}^2} \right) \cdot \text{ch} \alpha t + 2 \frac{\omega_0}{\Omega_{st}} \cdot \text{sh} \alpha t + \frac{4\Omega_E^2}{\Omega_{st}^2} \cdot \cos \Omega_{st} t \right] \cdot e^{-\gamma t},$$

$$P_2^I(t) = 2 \cdot \left(\frac{\Omega_E}{\Omega_{st}} \right)^2 \cdot (\text{ch} \alpha t - \cos \Omega_{st} t) \cdot e^{-\gamma t},$$

$$P_2^{II}(t) = \frac{1}{2} \cdot \left[\left(1 + \frac{\omega_0^2}{\Omega_{st}^2} \right) \cdot \text{ch} \alpha t + \frac{\omega_0}{\Omega_{st}} \cdot \text{sh} \alpha t + \frac{4\Omega_E^2}{\Omega_{st}^2} \cdot \cos \Omega_{st} t \right] \cdot e^{-\gamma t} = P_1^I(t),$$

$$\Omega_{st} = \sqrt{\omega_0^2 + 4\Omega_E^2}, \quad \alpha = \frac{\omega_0}{\Omega_{st}} \cdot (\gamma_2 - \gamma_1), \quad \gamma = \gamma_1 + \gamma_2,$$

t – время пролёта атома через интерферометр. Отметим, что $P_2^{II}(t)$ совпадает с $P_1^I(t)$. Аналогично записываются выражения (19.30) для двойного интерферометра со статическим полем

$$P_2^I(t_3) = \left(\frac{4\Omega_E}{\Omega_{st}} \cdot \sin \frac{\Omega_{st} \tau}{2} \right)^2 \cdot \left(\cos \frac{\Omega_{st} \tau}{2} \cdot \cos \frac{\omega_0 T}{2} - \frac{\omega_0}{\Omega_{st}} \cdot \sin \frac{\Omega_{st} \tau}{2} \cdot \sin \frac{\omega_0 T}{2} \right)^2, \quad (19.42)$$

$$P_1^I(t_3) = 1 - P_2^I(t_3), \quad t_3 = 2\tau + T.$$

Измеряя, аналогично § 19.2, зависимость потока атомов в $2^2P_{1/2}$ ($F=1$) состоянии от величины поля E (рис. 19.7) или времени пролёта T (для чего необходимо варьировать скорость атомов), можно из сравнения с функцией (19.42) найти значение $\omega_0 = 2\pi \cdot \Delta \nu_{SP}$. В экспериментах 80-х гг., проводившихся в "Курчатовском институте" (Москва), была достигнута точность измерения частоты перехода $\Delta \nu_{SP} = 2$ кГц, что позволило определить из (19.39) значение лэмбовского сдвига в атоме водорода с относительной точностью лучше $2 \cdot 10^{-6}$ (табл. 14.1).

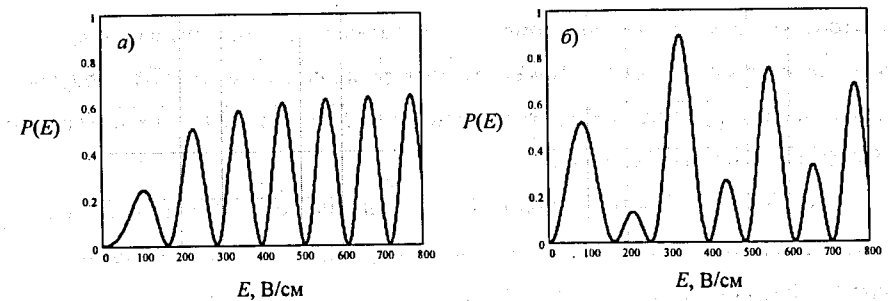


Рис. 19.7. Зависимость вероятности выхода атома из интерферометра в состоянии 2 от напряжённости электрического поля для переходов $2S \leftrightarrow 2P_{1/2}$:
а) простой интерферометр (19.41), $t = T$; б) двойной (19.42).
Параметры: $\omega_0 = 2\pi \cdot 1$ ГГц, $\tau_2 = (2\gamma_2)^{-1} = 1,5$ нс, $T = 2\tau = 1,8$ нс

Особенность варианта спектрометра с электростатическим полем состоит в том, что для него $\Delta \omega = \omega_0 = \text{const}$ (см. (19.40)), поэтому для достижения максимума счёта нужно выбрать напряжённость электрического поля так, что

$$\Omega_E \sim \omega_0. \quad (19.43)$$

Для $2S \leftrightarrow 2P_{1/2}$ -переходов в атоме водорода это даёт

$$E \sim \frac{\hbar \omega_L}{3ea} \sim 300 \text{ В/см.}$$

Короткое время жизни $2P$ -состояния в атоме водорода ($\tau_2 \sim 1,5 \text{ нс}$) приводит к необходимости использовать в эксперименте быстрые атомы водорода. Так, для "базы" длиной $L = 5 \text{ см}$ требуется их скорость (энергия) порядка $v \sim \frac{L}{2} \cdot \tau_2 \sim 1,5 \cdot 10^7 \text{ м/с}$ ($\sim 1 \text{ МэВ}$). Уже при таких скоростях необходимо учитывать вклад доплеровского уширения.

Отметим также первые измерения лэмбовского сдвига с потоком атомов водорода, которые были выполнены в начале 80-х гг. на накопителе протонов с электронным охлаждением в ИЯФ им. Г.И. Будкера (Новосибирск). Их целью была проверка принципа относительности.

Атомный интерферометр со статическим магнитным полем чаще всего применяют в спектроскопии $1S$ -состояния. Поскольку в этом состоянии линейный эффект Штарка отсутствует (задача 14.1 и § 18.2), то применение электростатического интерферометра бессмысленно. Магнитное же поле, взаимодействуя с магнитным моментом электрона, не только смещает подуровни сверхтонкой структуры (эффект Зеемана, § 18.1 и рис. 18.6), но и вызывает интерференцию этих состояний.

Наиболее ярким примером применения электростатического интерферометра является измерение времени жизни позитрония в короткоживущем парасостоянии 1^1S_0 (§ 14.6). В этом эксперименте позитроний в долгоживущем ортосостоянии 1^3S_1 пропускают через магнитное поле, в котором в результате интерференции его 1^3S_1 ($m_F = 0$) и 1^1S_0 -состояний он часть времени "проводит" в парасостоянии, аннигилируя с характерным временем примерно 125 пс. Измеряя зависимость потока ортопозитрония на выходе из магнитного поля от его величины (задача 19.3 и рис. 19.8 ниже), можно сравнением экспериментальных результатов с функцией (19.45) (см. ниже) найти время жизни парасостояния.

Задача 19.3. Атом позитрония помещён в магнитное поле B и в момент $t = 0$ находится в "верхнем" 1^3S_1 ($m_F = 0$) состоянии. Найти вероятность обнаружить этот атом в том же состоянии в момент t .

Для решения этой задачи у нас уже есть все результаты. Действительно, мы знаем, как интерферируют состояния позитрония 1^3S_1 ($m_F = 0$) и 1^1S_0 в магнитном поле (задача 18.3), как выглядят матричные элементы V_{24} и V_{42} , "ответственные" за эту интерференцию. Поэтому уравнения (19.8) для амплитуд "возмущённой" волновой функции можно записать в данном случае сразу, учитывая замены (19.40):

$$\begin{aligned} \frac{da_1}{dt} &= -i\omega_B a_2 \cdot e^{-i\omega_0 t} - \gamma_1 a_1, \\ \frac{da_2}{dt} &= -i\omega_B a_1 \cdot e^{-i\omega_0 t} - \gamma_2 a_2, \end{aligned} \quad (19.44)$$

$$\omega_0 = \frac{\delta \epsilon_{P_3|1S}}{\hbar}, \quad \omega_B = \frac{V_{24}}{\hbar} = \frac{V_{42}}{\hbar} = \frac{2\mu_B B}{\hbar} = \frac{eB}{m_e c}.$$

Напомним, что здесь $\delta \epsilon_{P_3|1S}$ – разность энергий уровней сверхтонкой структуры $1S$ -состояния позитрония (14.65), γ_1, γ_2 – постоянные "распада" (аннигиляции) позитрония в состояниях 1^3S_1 (амплитуда a_1) и 1^1S_0 (амплитуда a_2), определённые через времена жизни этих состояний (19.7). Последняя цепочка равенств выписана специально, дабы подчеркнуть связь между матричным элементом и циклотронной частью ω_B .

Дальнейшая процедура совпадает с выполненной в задаче 19.1, а окончательный результат – с формулами (19.21), (19.44) при соответствующих заменах:

$$\begin{aligned} P_{o-p_3}(t) \equiv P_2^{II}(t) &= \frac{1}{2} \cdot \left[\left(1 + \frac{\omega_0^2}{\Omega_B^2} \right) \cdot \text{ch} \alpha t + \frac{\omega_0}{\omega_B} \cdot \text{sh} \alpha t + \frac{4\omega_B^2}{\Omega_B^2} \cdot \cos \Omega_B t \right] \cdot e^{-\gamma t}, \\ \Omega_B &= \sqrt{\omega_0^2 + 4\omega_B^2}, \quad \alpha = \frac{\omega_0}{\Omega_B} \cdot (\gamma_2 - \gamma_1), \quad \gamma = \gamma_1 + \gamma_2. \end{aligned} \quad (19.45)$$

Измеряя в эксперименте зависимость $P_2^{II}(t)$, можно найти значение одного из параметров позитрония. Как показывают расчёты (рис. 19.8), вид функции $P_2^{II}(t)$ наиболее чувствителен к значению $\gamma_1 = 1/2\tau_1$ – т.е. времени жизни позитрония в парасостоянии.

В литературе формулы (19.45) часто записывают в несколько ином виде, через безразмерный параметр магнитного поля x , введённый в задаче 18.3, и параметр $y(x)$:

$$x = \frac{B}{B_\Delta}, \quad y(x) = \frac{\sqrt{1+x^2}-1}{x} = \frac{\Omega_B - \omega_0}{\omega_B}. \quad (19.46)$$

Тогда

$$\begin{aligned}
P_{o-Ps}(t) &= \frac{1}{(1+y^2)^2} \cdot (e^{-\Gamma_o t} + y^4 e^{-\Gamma_p t} + 2y^2 \cdot e^{-\Gamma t} \cdot \cos \sqrt{1+x^2} \omega_0 t), \\
P_{p-Ps}(t) &= \frac{y^2}{(1+y^2)^2} \cdot (e^{-\Gamma_o t} + e^{-\Gamma_p t} + 2 \cdot e^{-\Gamma t} \cdot \cos \sqrt{1+x^2} \omega_0 t), \\
\Gamma_o &= \frac{1}{\tau_{o-Ps}}, \quad \Gamma_p = \frac{1}{\tau_{p-Ps}}, \quad \Gamma = \Gamma_o + \Gamma_p \approx \Gamma_p, \\
\Gamma'_o &= \frac{\Gamma_o + y^2 \Gamma_p}{1+y^2}, \quad \Gamma'_p = \frac{\Gamma_p + y^2 \Gamma_o}{1+y^2}.
\end{aligned}
\tag{19.47}$$

Из этих соотношений отчётливо видно, что время жизни орто- и парасостояний позитрония в магнитном поле $B \sim B_\Delta$ ($y \sim 1$) определяется коротким временем жизни "чистого" (вне поля) парасостояния. В этом и выражается, прежде всего, эффект интерференции состояний.

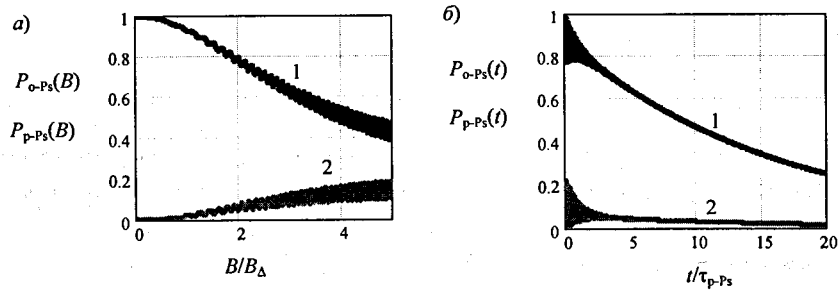


Рис. 19.8. Зависимость функций $P_{o-Ps}(t, B)$ (кривые 1) и $P_{p-Ps}(t, B)$ (кривые 2) от величины магнитного поля при $t = 2\tau_{p-Ps}$ (а) и от времени при $B = 2$ Тл (б). Размытие кривых – результат быстрой осцилляции функций, отражающей эффект интерференции состояний

В спектроскопии атома водорода и других лёгких элементов часто применяют комбинацию статического магнитного и микроволнового электромагнитного полей. При этом частоту микроволнового поля можно держать постоянной, что технически гораздо проще, а статическое магнитное поле медленно варьировать, настраивая на максимальное число событий в единицу времени. Один из вариантов такого комбинированного интерферометра состоит в сочетании метода Штерна–Герлаха (§ 11.6) и метода ЭПР (§ 18.3). Интерферометр имеет практически ту же схему, что показана на рис. 19.4, только в данном случае роль поляризатора и анализатора играют электромагниты Штерна–Герлаха с высоким градиентом поля, а на месте свободного промежутка

находится магнит с однородным полем B и СВЧ-резонатором, настроенным на частоту измеряемого перехода. Магнит-поляризатор пропускает поток атомов с определённой поляризацией (например, в состоянии $1^2S_{1/2}$, $F=0$, рис. 14.5). При частоте поля резонатора, близкой к частоте перехода $1^2S_{1/2}$, $F=0 \leftrightarrow F=1$, атомы, совершившие переход, меняют тем самым направление поляризации и отклоняются в магните-анализаторе в противоположную сторону и поступают в детектор. Зависимость скорости счёта от значения поля B имеет вид резонансной кривой, аналогичной изображённой на рис. 19.3. Положение её максимума позволяет найти частоту перехода. Таким методом были проведены, в частности, первые прецизионные измерения сверхтонкой структуры $1^2S_{1/2}$ -состояния атома водорода.

Заключение

Уважаемый читатель!

Авторы надеются, что, перевернув последнюю страницу этой книги, Вы навсегда сохраните интерес к необычному микромиру квантовой физики и желание глубже познать её законы.

Атомные постоянные и основные обозначения^{*)}

Классический радиус электрона $r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} = 2,817940325(28) \cdot 10^{-15} \text{ м}$

Постоянная Планка $h = 2\pi \cdot \hbar = 6,626\ 0693(11) \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$
 $\hbar = 6,582\ 119\ 15(56) \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{с}$

Постоянная тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = 7,297\ 352\ 568(24) \cdot 10^{-3} = \frac{1}{137,035\ 999\ 11(46)}$$

Бора радиус $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{r_e}{\alpha^2} = 0,529\ 177\ 2108(18) \cdot 10^{-10} \text{ м}$

Постоянная Ридберга $Ry = \frac{m_e^4}{4\pi c \hbar^3} = 10\ 973\ 731,534(13) \text{ м}^{-1}$

Ридберга энергия $m_e c^2 \alpha^2 / 2 = 13,605\ 6923(12) \text{ эВ}$

Магнетон Бора $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5,788\ 381\ 749(43) \cdot 10^{-11} \text{ МэВ/Тл}$

Масса электрона $m_e = 0,510\ 998\ 902(21) \text{ МэВ}/c^2$

Масса протона $m_p = 938,272\ 029(80) \text{ МэВ}/c^2$

Масса нейтрона $m_n = 938,565\ 33(4) \text{ МэВ}/c^2$

Ядерный магнетон $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 3,152\ 451\ 259(21) \cdot 10^{-14} \text{ МэВ/Тл}$

Фундаментальные физические постоянные

Скорость света в вакууме $c = 299\ 792\ 458 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$

Постоянная Авогадро $N_A = 6,022\ 1415(10) \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$

Атомная единица массы $m_u = m(^{12}\text{C})/12 = 931,494\ 043(80) \text{ МэВ}/c^2$

Электронвольт $\{e\}$, $1\text{эВ} = 1,602\ 176\ 53(14) \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$

Постоянная Больцмана $k = 8,617\ 342(15) \cdot 10^{-5} \text{ эВ} \cdot \text{К}^{-1}$

Связь энергии и длины волны фотона $\epsilon = hc/\lambda$, $\epsilon \cdot \lambda = 1239,84191 \text{ эВ} \cdot \text{нм}$

Элементарный заряд $e = 1,602\ 176\ 53(14) \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$

Электрон

Масса $m_e = 9,109\ 3826(16) \cdot 10^{-31} \text{ кг} = 0,510\ 998\ 918(44) \text{ МэВ}/c^2$

Комптоновская длина волны $\lambda_C = \hbar/(m_e c) = r_e/a = 3,861\ 592\ 678(26) \cdot 10^{-13} \text{ м}$

Классический радиус $r_e = e^2/4\pi\epsilon_0 m_e c^2 = 2,817\ 940\ 325(28) \cdot 10^{-15} \text{ м}$

Магнитный момент $\mu_e = 1,001\ 159\ 652\ 187(4) \cdot \mu_B$

Аномалия магнитного момента $a_e = \mu_e/\mu_B - 1 = 1,159\ 652\ 187(10) \cdot 10^{-3} \text{ g-фактор}$

^{*)} www.cern.ch/pdg

Протон

Масса	$m_p = 1,672\,621\,71(29) \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 938,271\,029(80) \text{ МэВ}/c^2$
Отношение массы протона к массе электрона	$m_p/m_e = 1836,152\,672\,61(85)$
Комптоновская длина волны	$\lambda_{c,p} = 1,321\,410\,02(12) \cdot 10^{-15} \text{ м}$
Магнитный момент	$\mu_p = 2,792\,847\,337(29) \cdot \mu_N$
Гиромагнитное отношение	$g_p = 26\,752\,212\,8(81) \cdot 10^4 \cdot \text{Тл}^{-1} \text{ с}^{-1}$

Нейтрон

Магнитный момент	$\mu_n = -1,913\,0427(5) \cdot \mu_N$
------------------	---------------------------------------

Литература

1. Мешков И.Н. Классическая механика. Дубна: ОИЯИ, 2003.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
3. Мухин К.Н. Экспериментальная ядерная физика, т. 1. М.: Энергоатомиздат, 1983.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Наука, 1968.
5. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Релятивистская квантовая теория, часть 1. М.: Наука, 1968.
6. Ферми Э. Квантовая механика (конспект лекций). М.: Мир, 1968.
7. Ву Ц.С., Мошковский С.А. Бета-распад. М.: Атомиздат, 1970.
8. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1981.
9. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Лань, 2004.
10. Батыгин В.В., Топтыгин И.Н. Сборник задач по электродинамике. М.: Наука, 1970.
11. Мешков И.Н., Чириков Б.В. Электромагнитное поле. Новосибирск: Наука. Сибирское отделение, 1987.
12. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1969.
13. Физические величины /Под редакцией И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.

Предметный указатель

1-й постулат, 16

2-й постулат, 16

Адроны, 139

Аксиальный вектор, 123

Барионный заряд, 120

Барионы, 139

Бозоны, 139, 169

Вероятностная

импульсная функция, 97

интерпретация, 47

Вероятностные процессы, 12

Вероятность

дипольного перехода, 261

магнитодипольного перехода,
272

спонтанного перехода, 277

электрического квадрупольного
перехода, 271

Возбуждённые атомы, 273

Возможные значения

энергии квантового

осциллятора, 92

квантового числа, 183

Волна, 24

вероятности, 48

де Бройля, 28

длина, 26

Время жизни свободного атома, 278

Выделенное направление, 127, 130, 143,
154, 293

Вынужденное излучение, 278

Вырожденное состояние, 184, 201, 296

Вырождение уровней, 196, 208

Гамильтониан (оператор Гамильтона),
100, 108

Гиромагнитное отношение, 149

Граничные условия, 57

Групповая скорость, 28

Группы

главные, 249

промежуточные, 249

Двухуровневая система, 254

Действительные функции, 67

Дельта-функция, 29

Домен, 304

Доплеровский сдвиг, 287

Доплеровское уширение, 287

Естественная ширина линии, 280, 287

Закон

излучения, 14

сохранения чётности, 114

Зарядовое сопряжение

(С-преобразование), 120

Заселённость уровней, 279

Зеемановские подуровни, 303

Интерференционные фильтры, 66

Интерференция состояний, 256

Интерферометр

атомный, 310

со статическим маг-
нитным полем, 326

со статическим элект-
рическим полем, 322, 325

двойной атомный, 316, 318, 322

простой, 321, 322

Калибровочные преобразования, 154

Квазиклассическое приближение, 69

Квантование момента, 158, 163

Квантовые

генераторы, 279

числа атома, 291

Кванты излучения, 16

Классический радиус электрона, 17

Классическое соотношение

неопределённостей, 280

Комптоновская длина волны, 22

Коэффициент прохождения
(прозрачности), 62

Коэффициенты Эйнштейна, 277

Лазерная спектроскопия, 308

Лазеры, 279, 282

Лапласиан, 43

Лауэграмма, 24

Лептонный заряд, 120

Лептоны, 139

Линейный осциллятор, 88

Линейчатый спектр, 14, 284

Лэмбовский сдвиг, 231, 232, 310, 314

Магнетон

Бора, 115, 150, 163

ядерный, 150

Магнитное квантовое число, 128, 162,
290

Магнитный момент ядра, 290

Мазеры, 279, 282

Матрицы Паули, 146

Матричный элемент

возмущения, 258

магнитодипольного момента,
272

оператора, 199

электрического дипольного
момента, 261

Мезоны, 139

Метастабильные состояния, 285

Метод

адиабатического

размагничивания (магнитное
охлаждение), 115, 116, 117

ВКБ, 62, 67, 69

коэффициентов Эйнштейна, 274

операторов, 96

разделения переменных, 131

Множитель Ланде, 292

Монохроматическое возмущение, 258

Мюон, 42

Накачка, 279

Нарушение

закона сохранения чётности в
слабых взаимодействиях, 114, 119

СР-инвариантности, 122

Нелинейная оптика, 282

Непрерывная генерация, 283

Номер состояния, 168

Нормальная связь (приближение

Рессель – Саундерса, LS-связь), 246

Нулевая энергия квантового

осциллятора, 92

Область свободной дисперсии, 307

Обменное взаимодействие, 170

Обобщенный импульс, 152

Обратный бета-распад нейтрона, 122

Обращение времени (Т-преобразование),
121

Одночастичное приближение, 242

Одноэлектронное приближение, 216

Оператор

квантово-механический, 99

квантово-механическая скобка

Пуассона (коммутатор), 105

момента импульса, 123

сверхтонкого магнитного

расщепления, 222

спина, 143

энергии тонкого расщепления,
210

эрмитовый (самосопряжен-
ный), 103, 108

Оптический диапазон, 287

Опыт Штерна–Герлаха, 162

Орбитальный момент, 138, 140

Орбитальное квантовое число, 129

Ортонормированность, 102, 104

Плотность потока вероятности, 55

Полный момент импульса, 140

Положительная обратная связь, 283

Поляризация, 293

Полярные диаграммы, 192

Последовательность заполнения слоёв,
247

Постоянная

тонкой структуры, 17, 208

Ридберга, 18

Потенциал ионизации атома, 252

Потенциальное поле, 45

Правило

Бора квантования орбит, 17

сложения чётностей, 137

Преобразование инверсии

(P-преобразование), 120

Прецессия Томаса, 208, 209, 215

Принцип дополнительности, 39

неразличимости, 166

Паули, 247

Полиномы

присоединенные Лежандра, 132,

Эрмита, 90

Проекция момента частицы, 128

Просветление среды, 281

Пси-функция, 47

Радиальная плотность вероятности, 189

Радиационные поправки, 232, 241

Радиоспектроскопия, 304, 307

Разрешающая способность, 307
Резонанс
антиферромагнитный, 304
магнитный, 302
ферримагнитный, 304
ферромагнитный, 304
электронный парамагнитный,
303
ядерный магнитный, 303
Резонансное возмущение, 254, 257
Сверхтонкая структура, 216
Свойство симметрии волновой функции,
111
Сдвиг
изотопический, 177, 183
уровня тонкой структуры, 211
штарковский (штарковское
расщепление), 301
Сильное взаимодействие, 119
Слабое взаимодействие, 114
Собственное значение оператора, 101
Собственные функции оператора, 101
Состояние
смешанное, 256
чистое, 256
Сохранение комбинированной (СР)
чётности в слабых взаимодействиях
(СР-инвариантность), 122
Спектроскопия атомная, 306
Спин (собственный момент), 138
Спиновая переменная, 143
Спиновое квантовое число, 140
Спинор, 144
Спин-орбитальное взаимодействие, 203,
206
энергия, 208
Сплошной спектр, 285
Среднее значение
импульса, 98
квадрата оператора, 130
СРТ-теорема, 122
Статистика Бозе-Эйнштейна, 139
Ферми-Дирака, 139
Термы, 195
Точечный диполь, 225
Туннелирование, 72, 73
Туннельный эффект, 66

Ультрахолодные нейтроны, 82
Уравнение
Дирака, 152, 209
непрерывности в дифференци-
альной форме, 54
непрерывности в интегральной
форме, 54
Паули, 152, 153
Шрёдингера, 46, 193
временное, 56
стационарное, 56, 198
для сферически-
симметричного
потенциала, 74
на собственные значения
оператора, 101
Уровни
Ландау, 157
энергии атома, 18
Условие
генерации, 284
гладкости, 68, 70
нормировки, 47, 52
волновой функции
системы, 52
Усреднение по поляризациям, 278
Уширение полосы частот, 280
Фазовая скорость, 28
Фазовый объём, 167
Фермионы, 139, 168, 169
Физический вакуум, 231
Фотон, 16, 139
корпускулярные свойства, 22
собственный момент, 267
Центробежный потенциал, 179, 196
Частица, 22, 24,
нерелятивистская, 44
субатомная, 12
Частота
классического осциллятора, 89
ларморовской прецессии, 158
прецессии спина электрона, 159
циклотронная, 159
Шаровые функции, 132, 133
Ширина амплитудной функции, 33

Электродипольные переходы, 262
правила отбора, 264, 267, 268
Электронное нейтрино, 121
Эффект
Доплера, 280
Пашена-Бака, 294
простой Зеемана, 290, 291
сложный Зеемана, 290, 294
Штарка, 202, 323