

КРАТКИЙ КУРС ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Книга 2

Л. Д. ЛАНДАУ и Е. М. ЛИФШИЦ

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

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



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
МОСКВА 1972

530.1

Л 22

УДК 530.145

Лев Давидович Ландау
и *Евгений Михайлович Лифшиц*

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
М., 1972 г., 368 стр. с илл.

Редактор *Л. И. Гладнева*
Техн. редактор *С. Я. Шкляр*
Корректор *Н. Б. Румянцева*

Сдано в набор 27/III 1972 г. Подписано к печати 25/VII 1972 г. Бумага 84×108¹/₃₂. Физ. печ. л. 11,5. Условн. печ. л. 19,32. Уч.-изд. л. 19,76. Тираж 95 000 экз. Т-03324. Цена книги 79 к. Заказ № 2861

Издательство «Наука»

Главная редакция
физико-математической литературы
117071, Москва, В-71, Ленинский проспект, 15

Ордена Трудового Красного Знамени
Первая Образцовая типография
имени А. А. Жданова
Главполиграфпрома Государственного комитета
Совета Министров СССР по делам издательств,
полиграфии и книжной торговли.
Москва, М-54, Валуевая, 28

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
Некоторые обозначения	8

ЧАСТЬ I. НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ

<i>Глава I. Основные понятия квантовой механики</i>	9
§ 1. Принцип неопределенности	9
§ 2. Принцип суперпозиции	16
§ 3. Операторы	19
§ 4. Сложение и умножение операторов	25
§ 5. Непрерывный спектр	27
§ 6. Предельный переход	30
§ 7. Матрица плотности	33
<i>Глава II. Законы сохранения в квантовой механике</i>	35
§ 8. Гамильтониан	35
§ 9. Дифференцирование операторов по времени	36
§ 10. Стационарные состояния	38
§ 11. Матрицы физических величин	41
§ 12. Импульс	46
§ 13. Соотношения неопределенности	50
§ 14. Момент импульса	51
§ 15. Собственные значения момента	55
§ 16. Собственные функции момента	59
§ 17. Сложение моментов	61
§ 18. Правила отбора по моменту	65
§ 19. Четность состояния	69
<i>Глава III. Уравнение Шредингера</i>	73
§ 20. Уравнение Шредингера	73
§ 21. Плотность потока	75
§ 22. Общие свойства решений уравнения Шредингера	78
§ 23. Обращение времени	82
§ 24. Потенциальная яма	84
§ 25. Линейный осциллятор	88
§ 26. Квазиклассическая волновая функция	92
§ 27. Правило квантования Бора — Зоммерфельда	95
§ 28. Коэффициент прохождения	101
§ 29. Движение в центрально-симметричном поле	106
§ 30. Сферические волны	110
§ 31. Движение в кулоновом поле	115
<i>Глава IV. Теория возмущений</i>	121
§ 32. Возмущения, не зависящие от времени	121
§ 33. Секулярное уравнение	126
§ 34. Возмущения, зависящие от времени	128

§ 35. Переходы в непрерывном спектре	131
§ 36. Промежуточные состояния	134
§ 37. Соотношение неопределенности для энергии	135
§ 38. Квазистационарные состояния	138
Глава V. Спин	141
§ 39. Спин	141
§ 40. Оператор спина	144
§ 41. Спиноры	146
§ 42. Поляризация электронов	151
§ 43. Частица в магнитном поле	154
§ 44. Движение в однородном магнитном поле	156
Глава VI. Тождественность частиц	158
§ 45. Принцип неразличимости одинаковых частиц	158
§ 46. Обменное взаимодействие	162
§ 47. Вторичное квантование. Случай статистики Бозе	165
§ 48. Вторичное квантование. Случай статистики Ферми	171
Глава VII. Атом	174
§ 49. Атомные уровни энергии	174
§ 50. Состояния электронов в атоме	176
§ 51. Тонкая структура атомных уровней	179
§ 52. Периодическая система элементов Менделеева	183
§ 53. Рентгеновские термы	190
§ 54. Атом в электрическом поле	192
§ 55. Атом в магнитном поле	197
Глава VIII. Двухатомная молекула	202
§ 56. Электронные термы двухатомной молекулы	202
§ 57. Пересечение электронных термов	204
§ 58. Валентность	207
§ 59. Колебательная и вращательная структура термов двухатомной молекулы	213
§ 60. Параводород и ортоводород	217
§ 61. Ван-дер-ваальсовы силы	219
Глава IX. Упругие столкновения	223
§ 62. Амплитуда рассеяния	223
§ 63. Условие квазиклассичности рассеяния	226
§ 64. Дискретные уровни энергии как полюсы амплитуды рассеяния	228
§ 65. Рассеяние медленных частиц	230
§ 66. Резонансное рассеяние при малых энергиях	233
§ 67. Формула Борна	236
§ 68. Формула Резерфорда	242
§ 69. Столкновения одинаковых частиц	244
§ 70. Упругие столкновения быстрых электронов с атомами	247
Глава X. Неупругие столкновения	251
§ 71. Принцип детального равновесия	251
§ 72. Упругое рассеяние при наличии неупругих процессов	255
§ 73. Неупругое рассеяние медленных частиц	257
§ 74. Неупругие столкновения быстрых частиц с атомами	258

ЧАСТЬ II. РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ

Глава XI. Фотон	262
§ 75. Соотношения неопределенности в релятивистской области	262
§ 76. Квантование свободного электромагнитного поля	267
§ 77. Фотоны	272
§ 78. Момент и четность фотона	274
Глава XII. Уравнение Дирака	278
§ 79. Уравнение Клейна—Фока	278
§ 80. Четырехмерные спиноры	280
§ 81. Инверсия спиноров	284
§ 82. Уравнение Дирака	286
§ 83. Матрицы Дирака	289
§ 84. Плотность тока в уравнении Дирака	293
Глава XIII. Частицы и античастицы	297
§ 85. Ψ -операторы	297
§ 86. Частицы и античастицы	300
§ 87. Связь спина со статистикой	304
§ 88. Истинно нейтральные частицы	306
§ 89. Внутренняя четность частиц	309
§ 90. <i>CPT</i> -теорема	311
§ 91. Нейтрино	316
Глава XIV. Электрон во внешнем поле	319
§ 92. Уравнение Дирака для электрона во внешнем поле	319
§ 93. Магнитный момент электрона	320
§ 94. Спин-орбитальное взаимодействие	324
Глава XV. Излучение	327
§ 95. Оператор электромагнитного взаимодействия	327
§ 96. Спонтанное и вынужденное испускание	331
§ 97. Дипольное излучение	333
§ 98. Мультипольное излучение	336
§ 99. Излучение атомов	338
§ 100. Инфракрасная катастрофа	340
§ 101. Рассеяние света	343
§ 102. Естественная ширина спектральных линий	347
Глава XVI. Диаграммы Фейнмана	350
§ 103. Матрица рассеяния	350
§ 104. Диаграммы Фейнмана	355
§ 105. Радиационные поправки	363
§ 106. Радиационный сдвиг атомных уровней	365
Предметный указатель	368

ПРЕДИСЛОВИЕ

Эта книга продолжает намеченную Львом Давидовичем Ландау программу, цель которой была уже указана в предисловии к первой книге: дать минимальный объем сведений по теоретической физике, который можно было бы рекомендовать для изучения всякому современному физiku, вне зависимости от его специализации.

Первая часть книги — нерелятивистская квантовая теория — следует написанной Л. Д. Ландау и мной «Квантовой механике» (том III полного курса). Сокращение достигнуто за счет исключения целых разделов, представляющих лишь более специальный интерес, а также большого числа методических деталей, предназначенных для профессиональных физиков-теоретиков. Естественно, что при таком сильном сокращении значительная часть текста должна была быть написана заново. Я стремился, однако, полностью сохранить весь характер и стиль изложения и нигде не допускать упрощения путем какой-либо вульгаризации понятий; упрощение достигается лишь за счет меньшей детализации. В первой части книги почти нет слов «можно показать», — излагаемые здесь результаты даются вместе с соответствующими выводами.

Последнее относится, однако, в меньшей степени ко второй части книги. Эта часть по характеру изложения следует написанной мной совместно с В. Б. Берестецким и Л. П. Питаевским «Релятивистской квантовой теории» (том IV полного курса). В ней даются, однако, лишь основы квантовой электродинамики. И здесь я стремился построить изложение таким образом, чтобы по возможности ясно выявить физические предпосылки и логическую структуру теории; но ввиду значительной сложности вычислений, с которыми обычно связано в этой области решение конкретных задач, ряд применений теории излагается лишь резуль-

тативным образом. При отборе материала в этой части книги я в определенной степени руководствовался также и содержанием курса лекций по квантовой электродинамике, прочитанных Л. Д. Ландау в МГУ в 1959/60 учебном году; я благодарен А. С. Компанейцу, Н. И. Будько и П. С. Кондратенко, предоставившим мне свои записи этих лекций.

Последняя глава книги («Диаграммы Фейнмана») несколько выпадает из общего стиля: как по своей сравнительной сложности, так и по тому, что она посвящена не столько физическим результатам, сколько методическим вопросам. Мне представлялось, однако, необходимым дать читателю хотя бы представление о происхождении и смысле понятий так называемой «диаграммной техники», глубоко проникших в современный аппарат теоретической физики (не ставя при этом себе целью научить фактическому применению этой техники для решения конкретных задач). При желании эта глава может быть опущена без нарушения целостности всей книги.

К моменту выхода этой книги исполнится десять лет с рокового дня 7 января 1962 г., когда автомобильная авария прервала научную и педагогическую деятельность Льва Давидовича. Среди тех, для кого предназначен этот краткий курс теоретической физики, уже никто не имел счастья слушать его лекции. Хочу надеяться, что этими книгами мне удастся в какой-то степени донести до читателей дух его педагогических идей, его стремление к ясности, стремление сделать сложные вещи простыми и тем самым выявить в их истинной простоте красоту законов природы.

Е. М. Лифшиц

Май 1971 г.

НЕКОТОРЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

Волновая функция, зависящая от времени, Ψ

Волновая функция без временного множителя ψ

Операторы обозначаются буквами со шляпкой $\hat{}$

Транспонирование оператора обозначается знаком $\sim$ над буквой

Эрмитово сопряжение оператора обозначается индексом $+$

Матричные элементы величины f : $f_{mn} = \langle m | f | n \rangle$

Гамильтониан $\hat{H}$

Энергия нерелятивистская E

Частоты переходов $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$

Энергия частицы релятивистская, включающая в себя энергию покоя, ϵ

Элемент объема конфигурационного пространства dq

Пространственный элемент объема $dV = dx dy dz$

Нормировочный объем Ω

Четырехмерные векторные индексы обозначаются (в части II) греческими буквами $\lambda, \mu, \nu, \dots$, пробегающими значения 0, 1, 2, 3

В части II используются релятивистские единицы, определенные на стр. 267

Ссылки на параграфы и формулы первой книги этого курса снабжены цифрой I

В конце книги помещен предметный указатель, который дополняет оглавление книги, не повторяя его. В указатель включены термины и понятия, непосредственно не отраженные в оглавлении.

Ч А С Т Ь I

НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ

Г л а в а I

ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

§ 1. Принцип неопределенности

Классические механика и электродинамика при попытке применить их к объяснению атомных явлений приводят к результатам, находящимся в резком противоречии с опытом. Наиболее ясно это видно из противоречия, получающегося при применении обычной электродинамики к модели атома, в которой электроны движутся вокруг ядра по классическим орбитам. При таком движении, как и при всяком ускоренном движении зарядов, электроны должны были бы непрерывно излучать электромагнитные волны. Излучая, электроны теряли бы свою энергию, что должно было бы привести в конце концов к их падению на ядро. Таким образом, согласно классической электродинамике, атом был бы неустойчивым, что ни в какой степени не соответствует действительности.

Такое глубокое противоречие теории с экспериментом свидетельствует о том, что построение теории, применимой к атомным явлениям,— явлениям, происходящим с частицами очень малой массы в очень малых участках пространства,— требует фундаментального изменения в основных классических представлениях и законах.

В качестве отправной точки для выяснения этих изменений удобно исходить из наблюдаемого на опыте явления так называемой дифракции электронов ¹⁾. Оказывается, что

¹⁾ Явление дифракции электронов было в действительности открыто после создания квантовой механики. В нашем изложении, однако, мы не придерживаемся исторической последовательности развития теории, а пытаемся построить его таким образом, чтобы наиболее ясно по-

при пропускании однородного пучка электронов через кристалл в прошедшем пучке обнаруживается картина чередующихся максимумов и минимумов интенсивности, вполне аналогичная дифракционной картине, наблюдаемой при дифракции электромагнитных волн. Таким образом, в некоторых условиях поведение материальных частиц — электронов — обнаруживает черты, свойственные волновым процессам.

Насколько глубоко противоречит это явление обычным представлениям о движении, лучше всего видно из следующего мысленного эксперимента, представляющего собой идеализацию опыта с электронной дифракцией от кристалла. Представим себе непроницаемый для электронов экран, в котором прорезаны две щели. Наблюдая прохождение пучка электронов через одну из щелей (в то время как другая щель закрыта), мы получим на поставленном за щелью сплошном экране некоторую картину распределения интенсивности; таким же образом получим другую картину, открывая вторую щель и закрывая первую. Наблюдая за прохождением пучка одновременно через обе щели, мы должны были бы, на основании обычных представлений, ожидать картину, являющуюся простым наложением обеих предыдущих, — каждый электрон, двигаясь по траектории, проходит через одну из щелей, не оказывая никакого влияния на электроны, проходящие через другую щель. Явление электронной дифракции показывает, однако, что в действительности мы получим дифракционную картину, которая благодаря интерференции отнюдь не сводится к сумме картин, даваемых каждой из щелей в отдельности. Ясно, что этот результат никаким образом не может быть совмещен с представлением о движении электронов по траектории.

Таким образом, механика, которой подчиняются атомные явления, — так называемая *квантовая* или *волновая механика*, — должна быть основана на представлениях о движении, принципиально отличных от представлений классической механики. В квантовой механике не существует понятия траектории частицы. Это обстоятельство составляет содержание так называемого *принципа неопределенности* —

казать, каким образом основные принципы квантовой механики связаны с наблюдаемыми на опыте явлениями.

одного из основных принципов квантовой механики, открытого *Вернером Гейзенбергом* в 1927 г. ¹⁾.

Отвергая обычные представления классической механики, принцип неопределенности обладает, можно сказать, отрицательным содержанием. Естественно, что сам по себе он совершенно недостаточен для построения на его основе новой механики частиц. В основе такой теории должны лежать, конечно, какие-то положительные утверждения, которые будут рассмотрены ниже (§ 2). Однако для того чтобы сформулировать эти утверждения, необходимо предварительно выяснить характер постановки задач, стоящих перед квантовой механикой. Для этого прежде всего остановимся на особом характере взаимоотношения, в котором находятся квантовая и классическая механики.

Обычно более общая теория может быть сформулирована логически замкнутым образом независимо от менее общей теории, являющейся ее предельным случаем. Так, релятивистская механика может быть построена на основании своих принципов без всяких ссылок на ньютоновскую механику. Формулировка же основных положений квантовой механики принципиально невозможна без привлечения механики классической.

Отсутствие у электрона ²⁾ определенной траектории лишает его самого по себе также и каких-либо других динамических характеристик ³⁾. Ясно поэтому, что для системы из одних только квантовых объектов вообще нельзя было бы построить никакой логически замкнутой механики. Возможность количественного описания движения электрона требует наличия также и физических объектов, которые с достаточной точностью подчиняются классической механике. Если электрон приходит во взаимодействие с таким «классическим объектом», то состояние последнего, вообще говоря, меняется. Характер и величина этого изменения

¹⁾ Интересно отметить, что полный математический аппарат квантовой механики был создан *Гейзенбергом* и *Шредингером* (1925—1926) до открытия принципа неопределенности, раскрывающего физическое содержание этого аппарата.

²⁾ В этом и следующем параграфах мы говорим для краткости об электро-не, имея в виду вообще любой квантовый объект, — частицу или систему частиц, к которым классическая механика неприменима.

³⁾ Речь идет о величинах, характеризующих движение электрона, а не о величинах, характеризующих электрон как частицу (заряд, масса), являющихся параметрами.

зависят от состояния электрона и поэтому могут служить его количественной характеристикой.

В этой связи «классический объект» обычно называют «прибором», а о его процессе взаимодействия с электроном говорят как об «измерении». Необходимо, однако, подчеркнуть, что при этом отнюдь не имеется в виду процесс «измерения», в котором участвует физик-наблюдатель. Под измерением в квантовой механике подразумевается всякий процесс взаимодействия между классическим и квантовым объектами, происходящий помимо и независимо от какого-либо наблюдателя. Выяснение глубокой роли понятия измерения в квантовой механике принадлежит *Нильсу Бору*.

Мы определили прибор как физический объект, с достаточной точностью подчиняющийся классической механике. Таковым является, например, тело достаточно большой массы. Однако не следует думать, что макроскопичность является обязательным свойством прибора. В известных условиях роль прибора может играть также и заведомо микроскопический объект, поскольку понятие «с достаточной точностью» зависит от конкретно поставленной задачи. Так, движение электрона в камере Вильсона наблюдается по оставляемому им туманному следу, толщина которого велика по сравнению с атомными размерами; при такой степени точности определения траектории электрон является вполне классическим объектом.

Таким образом, квантовая механика занимает очень своеобразное положение в ряду физических теорий — она содержит классическую механику как свой предельный случай и в то же время нуждается в этом предельном случае для самого своего обоснования.

Мы можем теперь сформулировать постановку задачи квантовой механики. Типичная постановка задачи заключается в предсказании результата повторного измерения по известному результату предыдущих измерений. Кроме того, мы увидим в дальнейшем, что законы квантовой механики приводят, вообще говоря, к ограничению (по сравнению с классической механикой) тех наборов значений, которые могут принимать различные физические величины, т. е. значений, которые могут быть обнаружены в результате измерения данной величины (например, энергии). Аппарат квантовой механики должен дать возможность определения этих дозволённых значений.

Процесс измерения обладает в квантовой механике очень существенной особенностью — он всегда оказывает воздействие на подвергаемый ему электрон, и это воздействие принципиально не может быть сделано (при данной точности измерения) сколь угодно слабым. Чем точнее измерение, тем сильнее оказываемое им воздействие, и лишь при измерениях очень малой точности воздействие на объект измерения может быть слабым. Это свойство измерений логически связано с тем, что динамические характеристики электрона появляются лишь в результате самого измерения; ясно, что если бы воздействие процесса измерения на объект могло быть сделано сколь угодно слабым, то это значило бы, что измеряемая величина имеет определенное значение сама по себе, независимо от измерений.

Среди различного рода измерений основную роль играет измерение координат электрона. Над электроном, в пределах справедливости квантовой механики, всегда может быть произведено измерение его координат с любой точностью ¹⁾.

Предположим, что через определенные интервалы времени производятся последовательные измерения координат электрона. Их результаты, вообще говоря, не лягут на какую-либо плавную кривую. Напротив, чем точнее производятся измерения, тем более скачкообразный, беспорядочный ход обнаружат их результаты, в соответствии с отсутствием для электрона понятия траектории. Более или менее плавная траектория получится лишь, если измерять координаты электрона с небольшой степенью точности, как, например, по конденсации капелек пара в камере Вильсона.

Если же, оставляя точность измерений неизменной, уменьшать интервалы Δt между измерениями, то соседние измерения дадут, конечно, близкие значения координат. Однако результаты ряда последовательных измерений хотя и будут лежать в малом участке пространства, но в этом участке будут расположены совершенно беспорядочным образом, отнюдь не укладываясь на какую-либо плавную кривую.

¹⁾ Еще раз подчеркнем, что говоря о «произведенном измерении», мы имеем в виду взаимодействие электрона с классическим «прибором», отнюдь не предполагающее наличия постороннего наблюдателя.

Последнее обстоятельство показывает, что в квантовой механике не существует понятия скорости частицы в классическом смысле этого слова, т. е. как предела, к которому стремится разность координат в два момента времени, деленная на интервал Δt между этими моментами. Однако в дальнейшем мы увидим, что в квантовой механике, тем не менее, может быть дано разумное определение скорости частицы в данный момент времени, которая при переходе к классической механике переходит в классическую скорость.

Но в то время как в классической механике в каждый данный момент частица обладает определенными координатами и скоростью, в квантовой механике дело обстоит совершенно иным образом. Если в результате измерения электрон получил определенные координаты, то при этом он вообще не обладает никакой определенной скоростью. Наоборот, обладая определенной скоростью, электрон не может иметь определенного местоположения в пространстве. Действительно, одновременное существование в любой момент времени координат и скорости означало бы наличие определенной траектории, каковой электрон не обладает.

Таким образом, в квантовой механике координаты и скорость электрона являются величинами, которые не могут быть одновременно точно измерены, т. е. не могут одновременно иметь определенных значений. Можно сказать, что координаты и скорость электрона — величины, не существующие одновременно. В дальнейшем будет выведено количественное соотношение, определяющее возможность неточного измерения координат и скорости в один и тот же момент времени.

Полное описание состояния физической системы в классической механике осуществляется заданием в данный момент времени всех ее координат и скоростей; по этим начальным данным уравнения движения полностью определяют поведение системы во все будущие моменты времени. В квантовой механике такое описание принципиально невозможно, поскольку координаты и соответствующие им скорости не существуют одновременно. Таким образом, описание состояния квантовой системы осуществляется меньшим числом величин, чем в классической механике, т. е. является менее подробным, чем классическое.

Отсюда вытекает очень важное следствие относительно характера предсказаний, делаемых в квантовой механике. В то время как классическое описание достаточно для того, чтобы предсказать движение механической системы в будущем совершенно точным образом, менее подробное описание в квантовой механике, очевидно, не может быть достаточным для этого. Это значит, что если электрон находится в состоянии, описанном наиболее полным в квантовой механике образом, то тем не менее его поведение в следующие моменты времени принципиально неоднозначно. Поэтому квантовая механика не может делать строго определенных предсказаний относительно будущего поведения электрона. При заданном начальном состоянии электрона последующее измерение может дать различные результаты. Задача квантовой механики состоит лишь в определении вероятности получения того или иного результата при этом измерении. Разумеется, в некоторых случаях вероятность некоторого определенного результата измерения может оказаться равной единице, т. е. перейти в достоверность, так что результат данного измерения будет однозначным.

В дальнейшем мы неоднократно убедимся, что далеко не всякая совокупность физических величин в квантовой механике может быть измерена одновременно, т. е. может иметь одновременно определенные значения (об одном примере — скорости и координатах электрона — мы уже говорили).

Большую роль в квантовой механике играют наборы физических величин, обладающие следующим свойством: эти величины измеримы одновременно, причем если они имеют одновременно определенные значения, то уже никакая другая физическая величина (не являющаяся их функцией) не может иметь в этом состоянии определенного значения.

О таких наборах физических величин мы будем говорить как о *полных наборах*.

Всякое описание состояния электрона возникает в результате некоторого измерения. Мы сформулируем теперь, что означает полное описание состояния в квантовой механике. Полным образом описанные состояния возникают в результате одновременного измерения полного набора физических величин. По результатам такого измерения можно, в частности, определить вероятность результатов

всякого последующего измерения независимо от всего, что происходило с электроном до первого измерения.

В дальнейшем везде (за исключением только §§ 7 и 42) под состояниями квантовой системы мы будем понимать состояния, описанные именно полным образом.

§ 2. Принцип суперпозиции

Радикальное изменение физических представлений о движении в квантовой механике по сравнению с классической требует, естественно, и столь же радикального изменения математического аппарата теории. В этой связи прежде всего возникает вопрос о способе описания состояния квантовой системы.

Условимся обозначать посредством q совокупность координат системы, а посредством dq — произведение дифференциалов этих координат (его называют элементом объема *конфигурационного пространства* системы); для одной частицы dq совпадает с элементом объема dV обычного пространства.

В классической механике состояние системы описывается заданием (в некоторый момент времени) всех ее координат q и скоростей $\dot{q}$. В квантовой механике такое описание, как мы видели, заведомо невозможно. Полное описание состояния системы означает здесь лишь значительно меньшее: возможность предсказания вероятностей тех или иных результатов измерения координат (или других величин) системы.

Основу математического аппарата квантовой механики составляет утверждение, что описание состояния системы осуществляется заданием определенной (вообще говоря, комплексной) функции координат $\Psi(q)$, причем квадрат модуля этой функции определяет распределение вероятностей значений координат: $|\Psi|^2 dq$ есть вероятность того, что произведенное над системой измерение обнаружит значения координат в элементе dq конфигурационного пространства. Функция Ψ называется *волновой функцией* системы¹⁾. Знание волновой функции позволяет, в принципе, вычислить вероятность различных результатов также и вся-

¹⁾ Она была впервые введена в квантовую механику *Шредингером* (1926).

кого вообще измерения (не обязательно измерения координат). При этом все эти вероятности определяются выражениями, билинейными по Ψ и Ψ^* . Наиболее общий вид такого выражения есть

$$\iint \Psi(q) \Psi^*(q') \varphi(q, q') dq dq', \quad (2,1)$$

где функция $\varphi(q, q')$ зависит от рода и результата измерения, а интегрирование производится по всему конфигурационному пространству. Сама вероятность $\Psi^* \Psi$ различных значений координат тоже является выражением такого вида.

С течением времени состояние системы, а с ним и волновая функция, вообще говоря, меняются. В этом смысле волновую функцию можно рассматривать как функцию также и от времени. Если волновая функция известна в некоторый начальный момент времени, то по самому смыслу понятия полного описания состояния она тем самым, в принципе, определена и во все будущие моменты времени. Фактическая зависимость волновой функции от времени определяется уравнениями, которые будут выведены в дальнейшем.

Сумма вероятностей всех возможных значений координат системы должна, по определению, быть равной единице. Поэтому нужно, чтобы результат интегрирования $|\Psi|^2$ по всему конфигурационному пространству был равен единице:

$$\int |\Psi|^2 dq = 1. \quad (2,2)$$

Это равенство представляет собой так называемое *условие нормировки* волновых функций. Если интеграл от $|\Psi|^2$ сходится, то выбором соответствующего постоянного коэффициента функция Ψ всегда может быть, как говорят, *нормирована*. Мы увидим, однако, в дальнейшем, что интеграл от $|\Psi|^2$ может расходиться, и тогда Ψ не может быть нормирована условием (2,2). В таких случаях $|\Psi|^2$ не определяет, конечно, абсолютные значения вероятности координат, но отношение квадратов $|\Psi|^2$ в двух различных точках конфигурационного пространства определяет относительную вероятность соответствующих значений координат.

Поскольку все вычисляемые с помощью волновой функции величины с непосредственным физическим смыслом

имеют вид (2,1), в котором Ψ входит умноженным на Ψ^* , то ясно, что нормированная волновая функция определена лишь с точностью до постоянного *фазового множителя* вида $e^{i\alpha}$, где α — любое вещественное число. Эта неоднозначность — принципиальная и не может быть устранена; однако она несущественна, так как не отражается ни на каких физических результатах.

В основе положительного содержания квантовой механики лежит ряд утверждений относительно свойств волновой функции, заключающихся в следующем.

Пусть в состоянии с волновой функцией $\Psi_1(q)$ некоторое измерение приводит с достоверностью к определенному результату 1, а в состоянии $\Psi_2^*(q)$ — к результату 2. Тогда утверждается, что всякая линейная комбинация Ψ_1 и Ψ_2 , т. е. всякая функция вида $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ (c_1, c_2 — постоянные) описывает состояние, в котором то же измерение дает либо результат 1, либо результат 2. Кроме того, можно утверждать, что если нам известна зависимость состояний от времени, которая для одного случая дается функцией $\Psi_1(q, t)$, а для другого — $\Psi_2(q, t)$, то любая их линейная комбинация тоже дает возможную зависимость состояния от времени.

Эти утверждения составляют содержание так называемого *принципа суперпозиции* состояний. Из него, в частности, следует, что уравнения, которым удовлетворяют волновые функции, должны быть линейными.

Рассмотрим систему, состоящую из двух частей, и предположим, что состояние этой системы задано так, что каждая из частей описана полным образом ¹⁾. Тогда можно утверждать, что вероятности координат q_1 первой части независимы от вероятностей координат q_2 второй части, и потому распределение вероятностей для системы в целом должно быть равно произведению вероятностей для ее частей. Это значит, что волновая функция $\Psi_{12}(q_1, q_2)$ системы может быть представлена в виде произведения волновых функций $\Psi_1(q_1)$ и $\Psi_2(q_2)$ ее частей:

$$\Psi_{12}(q_1, q_2) = \Psi_1(q_1) \Psi_2(q_2). \quad (2,3)$$

¹⁾ Тем самым, конечно, дано и полное описание состояния системы в целом. Подчеркнем, однако, что обратное утверждение отнюдь не справедливо: полное описание состояния системы как целого еще не определяет, вообще говоря, полным образом состояний ее отдельных частей (мы вернемся еще к этому вопросу в § 7).

Если обе части не взаимодействуют друг с другом, то такое соотношение между волновыми функциями системы и ее частей сохраняется и в будущие моменты времени:

$$\Psi_{12}(q_1, q_2, t) = \Psi_1(q_1, t) \Psi_2(q_2, t). \quad (2,4)$$

§ 3. Операторы

Рассмотрим некоторую физическую величину f , характеризующую состояние квантовой системы. Строго говоря, в нижеследующих рассуждениях следовало бы говорить не об одной величине, а сразу о полном их наборе. Однако все рассуждения от этого по существу не меняются, и в целях краткости и простоты мы говорим ниже всего лишь об одной физической величине.

Значения, которые может принимать данная физическая величина, называют в квантовой механике ее *собственными значениями*, а об их совокупности говорят как о *спектре* собственных значений данной величины. В классической механике величины пробегают, вообще говоря, непрерывный ряд значений. В квантовой механике тоже существуют физические величины (например, координаты), собственные значения которых заполняют непрерывный ряд; в таких случаях говорят о *непрерывном спектре* собственных значений. Наряду с такими величинами в квантовой механике существуют, однако, и другие, собственные значения которых образуют некоторый дискретный набор; в таких случаях говорят о *дискретном спектре*.

Будем считать сначала для простоты, что рассматриваемая величина f обладает дискретным спектром; случай непрерывного спектра рассматривается в § 5. Собственные значения величины f обозначим как f_n , где индекс n пробегает значения 0, 1, 2, 3, ... Обозначим волновую функцию системы в состоянии, в котором величина f имеет значение f_n , посредством Ψ_n . Волновые функции Ψ_n называют *собственными функциями* данной физической величины f . Каждая из этих функций предполагается нормированной, так что

$$\int |\Psi_n|^2 dq = 1. \quad (3,1)$$

Если система находится в некотором произвольном состоянии с волновой функцией Ψ , то произведенное над

нею измерение величины f даст в результате одно из собственных значений f_n . В соответствии с принципом суперпозиции можно утверждать, что волновая функция Ψ должна представлять собой линейную комбинацию тех из собственных функций Ψ_n , которые соответствуют значениям f_n , могущим быть обнаруженными с отличной от нуля вероятностью при измерении, произведенном над системой, находящейся в рассматриваемом состоянии. Поэтому в общем случае произвольного состояния функция Ψ может быть представлена в виде ряда

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n, \quad (3,2)$$

где суммирование производится по всем n , а a_n — некоторые постоянные коэффициенты.

Таким образом, мы приходим к выводу, что всякая волновая функция может быть, как говорят, разложена по собственным функциям любой физической величины. О системе функций, по которым можно произвести такое разложение, говорят как о *полной системе функций*.

Разложение (3,2) дает возможность определить вероятность обнаружения (путем измерения) у системы в состоянии с волновой функцией Ψ того или иного значения f_n величины f . Действительно, согласно сказанному в предыдущем параграфе, эти вероятности должны определяться некоторыми билинейными по Ψ и Ψ^* выражениями и потому должны быть билинейными по a_n и a_n^* . Далее, эти выражения, разумеется, должны быть положительными. Наконец, вероятность значения f_n должна обращаться в единицу, если система находится в состоянии с волновой функцией $\Psi = \Psi_n$, и должна обращаться в нуль, если в разложении (3,2) отсутствует член с данной Ψ_n . Единственной существенно положительной величиной, удовлетворяющей этому условию, является квадрат модуля коэффициента a_n . Таким образом, мы приходим к результату, что квадрат модуля $|a_n|^2$ каждого из коэффициентов разложения (3,2) определяет вероятность соответствующего значения f_n величины f в состоянии с волновой функцией Ψ . Сумма вероятностей всех возможных значений f_n должна быть равна единице; другими словами, должно быть

$$\sum_n |a_n|^2 = 1. \quad (3,3)$$

Введем понятие о *среднем значении* $\bar{f}$ величины f в данном состоянии. Соответственно обычному определению средних значений, определим $\bar{f}$ как сумму всех собственных значений f_n данной величины, умноженных на соответствующие вероятности $|a_n|^2$:

$$\bar{f} = \sum_n f_n |a_n|^2. \quad (3,4)$$

Напишем $\bar{f}$ в виде выражения, которое бы содержало не коэффициенты разложения функции Ψ , а саму эту функцию. Поскольку в (3,4) входят произведения $a_n^* a_n$, то ясно, что искомое выражение должно быть билинейным по Ψ^* и Ψ . Введем некоторый математический *оператор*, который мы обозначим как $\hat{f}$ ¹⁾ и определим следующим образом. Пусть $(\hat{f}\Psi)$ обозначает результат воздействия оператора $\hat{f}$ на функцию Ψ . Определение $\hat{f}$ состоит в том, что интеграл от произведения $(\hat{f}\Psi)$ на комплексно сопряженную функцию Ψ^* дает среднее значение $\bar{f}$:

$$\bar{f} = \int \Psi^* (\hat{f}\Psi) dq. \quad (3,5)$$

Билинейность выражения (3,5) по Ψ^* и Ψ означает, что сам оператор $\hat{f}$ должен быть, как говорят, *линейным*. Так называют операторы, обладающие свойствами²⁾:

$$\hat{f}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{f}\Psi_1 + \hat{f}\Psi_2, \quad \hat{f}(a\Psi) = a\hat{f}\Psi,$$

где Ψ_1, Ψ_2 — произвольные функции, а a — произвольная постоянная.

Таким образом, каждой физической величине в квантовой механике приводится в соответствие определенный линейный оператор.

Если функцией Ψ является одна из собственных функций Ψ_n , то среднее значение $\bar{f}$ должно совпадать с определенным значением f_n , которое величина f имеет в этом состоянии:

$$\bar{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n dq = f_n.$$

¹⁾ Мы условимся обозначать везде операторы буквами со шляпкой.

²⁾ Ниже мы будем обычно, когда это не может привести к недоразумению, опускать скобки в выражении $(\hat{f}\Psi)$, причем оператор предполагается действующим на написанное вслед за ним выражение.

Очевидно, что для этого должно быть

$$\hat{f}\Psi_n = f_n \Psi_n, \quad (3,6)$$

т. е. в результате воздействия оператора $\hat{f}$ собственная функция Ψ_n просто умножается на соответствующее собственное значение f_n .

Таким образом, собственные функции данной физической величины являются решениями уравнения

$$\hat{f}\Psi = f\Psi, \quad (3,7)$$

где f — постоянная, а собственные значения — это те значения постоянной, при которых написанное уравнение имеет решения, удовлетворяющие требуемым условиям. Как мы увидим ниже, вид операторов для различных физических величин может быть установлен из прямых физических соображений, и тогда указанное свойство операторов дает возможность находить собственные функции и собственные значения путем решения уравнений (3,7).

Как собственные значения вещественной физической величины, так и ее средние значения во всяком состоянии — вещественны. Это обстоятельство накладывает определенное ограничение на свойства соответствующих операторов. Приравняв выражение (3,6) комплексно ему сопряженному, получим соотношение

$$\int \Psi^* (\hat{f}\Psi) dq = \int \Psi (\hat{f}^* \Psi^*) dq, \quad (3,8)$$

где $\hat{f}^*$ обозначает оператор, комплексно сопряженный с $\hat{f}$. Для произвольного линейного оператора такое соотношение, вообще говоря, не имеет места, так что оно представляет собой некоторое ограничение, накладываемое на возможный вид операторов. Для произвольного оператора $\hat{f}$ можно указать, как говорят, *транспонированный* с ним оператор $\tilde{f}$, определяемый так, чтобы было

$$\int \Phi (\hat{f}\Psi) dq = \int \Psi (\tilde{f}\Phi) dq, \quad (3,9)$$

где Ψ, Φ — две различные функции. Если выбрать в качестве функции Φ сопряженную с Ψ функцию Ψ^* , то сравнение с (3,8) показывает, что должно быть

$$\tilde{f} = \hat{f}^*. \quad (3,10)$$

Операторы, удовлетворяющие этому условию, называют *эрмитовыми*. Таким образом, операторы, соответствующие в математическом аппарате квантовой механике вещественным физическим величинам, должны быть эрмитовыми.

Формально можно рассматривать также и комплексные физические величины, т. е. величины, собственные значения которых комплексны. Пусть f есть такая величина. Тогда можно ввести комплексно сопряженную с ней величину f^* , собственные значения которой комплексно сопряжены с собственными значениями f . Оператор, соответствующий величине f^* , обозначим посредством $\hat{f}^+$. Его называют *сопряженным* оператору $\hat{f}$ и его необходимо, вообще говоря, отличать от комплексно сопряженного оператора $\hat{f}^*$. Действительно, по определению оператора $\hat{f}^+$ среднее значение величины f^* в некотором состоянии Ψ есть

$$\overline{f^*} = \int \Psi^* \hat{f}^+ \Psi dq.$$

С другой стороны, имеем

$$(\overline{f})^* = \left[\int \Psi^* \hat{f} \Psi dq \right]^* = \int \Psi \hat{f}^* \Psi^* dq = \int \Psi^* \tilde{f}^* \Psi dq.$$

Приравняв оба выражения, найдем, что

$$\hat{f}^+ = \tilde{f}^*, \quad (3,11)$$

откуда ясно видно, что $\hat{f}^+$, вообще говоря, не совпадает с $\hat{f}^*$. Условие (3,10) можно написать теперь в виде

$$\hat{f} = \hat{f}^+, \quad (3,12)$$

т. е. оператор вещественной физической величины совпадает со своим сопряженным (эрмитовы операторы называют поэтому также *самосопряженными*).

Пусть f_n, f_m — два различных собственных значения вещественной физической величины f , а Ψ_n, Ψ_m — соответствующие им собственные функции:

$$\hat{f} \Psi_n = f_n \Psi_n, \quad \hat{f} \Psi_m = f_m \Psi_m.$$

Умножив обе стороны первого из этих равенств на Ψ_n^* , а равенство, комплексно сопряженное второму, — на Ψ_m и вычтя их почленно друг из друга, получим

$$\Psi_m^* \hat{f} \Psi_n - \Psi_n \hat{f}^* \Psi_m^* = (f_n - f_m) \Psi_n \Psi_m^*.$$

Проинтегрируем обе части этого равенства по dq . Поскольку $\hat{f}^* = \hat{f}$, то в силу (3,9) интеграл от левой части равенства обратится в нуль, так что получим

$$(f_n - f_m) \int \Psi_n \Psi_m^* dq = 0.$$

При $f_n \neq f_m$ отсюда следует, что

$$\int \Psi_n \Psi_m^* dq = 0,$$

— различные собственные функции, как говорят, *взаимно ортогональны*. Вместе с условием нормировки этих функций этот результат можно записать в виде

$$\int \Psi_n \Psi_m^* dq = \delta_{nm}, \quad (3,13)$$

где $\delta_{nm} = 1$ при $n = m$ и $\delta_{nm} = 0$ при $n \neq m$.

Таким образом, совокупность собственных функций Ψ_n образует полную систему нормированных и ортогональных (или, как говорят для краткости, *ортонормированных*) функций.

Легко определить теперь коэффициенты a_n разложения (3,2). Для этого достаточно умножить обе стороны (3,2) на Ψ_m^* и проинтегрировать по dq . В силу (3,13) обратятся в нуль все члены суммы за исключением лишь члена с $n = m$, и мы найдем, что

$$a_m = \int \Psi \Psi_m^* dq. \quad (3,14)$$

Мы все время говорим здесь только об одной физической величине f , между тем как следовало бы говорить, как было отмечено в начале параграфа, о полной системе одновременно измеримых физических величин. Тогда мы нашли бы, что каждой из этих величин $f, g, \dots$ соответствует свой оператор $\hat{f}, \hat{g}, \dots$. Собственные функции Ψ_n соответствуют состояниям, в которых все рассматриваемые величины имеют определенные значения, т. е. соответствуют определенным наборам собственных значений $f_n, g_n, \dots$, и являются совместными решениями системы уравнений

$$\hat{f}\Psi = f\Psi, \quad \hat{g}\Psi = g\Psi, \dots$$

§ 4. Сложение и умножение операторов

Если $\hat{f}$ и $\hat{g}$ — операторы, отвечающие двум физическим величинам f и g , то сумме $f+g$ отвечает оператор $\hat{f}+\hat{g}$. Смысл сложения различных физических величин в квантовой механике, однако, существенно различен в зависимости от того, измеримы эти величины одновременно или нет. Если величины f и g одновременно измеримы, то операторы $\hat{f}$ и $\hat{g}$ имеют совместные собственные функции, которые являются в то же время и собственными функциями оператора $\hat{f}+\hat{g}$, а собственные значения последнего оператора равны суммам f_n+g_n .

Если же величины f и g не могут иметь одновременно определенных значений, то смысл их суммы $f+g$ более ограничен. Можно лишь утверждать, что среднее значение этой величины в произвольном состоянии равно сумме средних значений каждого из слагаемых в отдельности:

$$\overline{f+g} = \overline{f} + \overline{g}. \quad (4.1)$$

Что же касается собственных значений и функций оператора $\hat{f}+\hat{g}$, то здесь они не будут иметь, вообще говоря, никакого отношения к собственным значениям и функциям величин f и g . Очевидно, что если операторы $\hat{f}$ и $\hat{g}$ — эрмитовы, то эрмитовым будет и оператор $\hat{f}+\hat{g}$, так что его собственные значения вещественны и представляют собой собственные значения определенной таким образом новой величины $f+g$.

Пусть теперь снова f и g — одновременно измеримые величины. Наряду с их суммой можно ввести понятие и об их произведении как о величине, собственные значения которой равны произведениям собственных значений величин f и g . Легко видеть, что такой величине соответствует оператор, действие которого состоит в последовательном действии на функцию сначала одного, а затем другого оператора. Такой оператор изображается математически как произведение операторов $\hat{f}$ и $\hat{g}$. Действительно, если Ψ_n — общие собственные функции операторов $\hat{f}$ и $\hat{g}$, то имеем

$$\hat{f}\hat{g}\Psi_n = \hat{f}(g\Psi_n) = \hat{f}g_n\Psi_n = g_n\hat{f}\Psi_n = g_nf_n\Psi_n \quad (4.2)$$

(символ $\hat{f}\hat{g}$ обозначает оператор, действие которого на функцию Ψ заключается в последовательном действии сначала оператора $\hat{g}$ на функцию Ψ , а затем оператора $\hat{f}$ на функцию $\hat{g}\Psi$).

С тем же успехом мы могли бы взять вместо оператора $\hat{f}\hat{g}$ оператор $\hat{g}\hat{f}$, отличающийся от первого порядком множителей. Очевидно, что результат воздействия обоих этих операторов на функции Ψ_n будет одинаковым. Но поскольку всякая волновая функция Ψ может быть представлена в виде линейной комбинации функций Ψ_n , то отсюда следует, что одинаковым будет результат воздействия операторов $\hat{f}\hat{g}$ и $\hat{g}\hat{f}$ и на произвольную функцию. Этот факт может быть записан в виде символического равенства $\hat{f}\hat{g} = \hat{g}\hat{f}$ или

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0. \quad (4,3)$$

О таких двух операторах $\hat{f}$ и $\hat{g}$ говорят как о *коммутативных* друг с другом ¹⁾.

Таким образом, мы приходим к важному результату: если две величины f и g могут иметь одновременно определенные значения, то их операторы коммутативны.

Может быть доказана и обратная теорема: если операторы $\hat{f}$ и $\hat{g}$ коммутативны, то у них все собственные функции можно выбрать общими, что физически означает одновременную измеримость соответствующих физических величин. Таким образом, коммутативность операторов является необходимым и достаточным условием одновременной измеримости физических величин.

Если же величины f и g не измеримы одновременно, то понятие их произведения не имеет указанного выше прямого смысла. Это проявляется уже в том, что оператор $\hat{f}\hat{g}$ в этом случае не будет эрмитов, а потому не может соответствовать какой-либо физической величине. Действительно, по определению транспонированного оператора, пишем

$$\int \Psi \hat{f} \hat{g} \Phi dq = \int (\hat{g} \Phi) (\tilde{\hat{f}} \Psi) dq.$$

Здесь оператор $\tilde{\hat{f}}$ действует только на функцию Ψ , а опера-

¹⁾ Саму же разность $\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$ называют *коммутатором* двух операторов.

тор $\hat{g}$ — на Φ . Применив еще раз определение транспонированного оператора, пишем

$$\int \Psi \hat{f} \hat{g} \Phi dq = \int (\tilde{\hat{f}} \Psi) (\hat{g} \Phi) dq = \int \Phi \tilde{\hat{g}} \tilde{\hat{f}} \Psi dq.$$

Таким образом, мы получили интеграл, в котором по сравнению с первоначальным функции Ψ и Φ поменялись местами. Другими словами, оператор $\tilde{\hat{g}} \tilde{\hat{f}}$ есть оператор, транспонированный с $\hat{f} \hat{g}$, и мы можем написать

$$\widetilde{\hat{f} \hat{g}} = \tilde{\hat{g}} \tilde{\hat{f}}, \quad (4,4)$$

— оператор, транспонированный с произведением $\hat{f} \hat{g}$, есть произведение транспонированных множителей, написанных в обратном порядке. Взяв комплексно сопряженное от обеих сторон равенства (4,4), найдем, что

$$(\hat{f} \hat{g})^+ = \hat{g}^+ \hat{f}^+. \quad (4,5)$$

Если каждый из операторов $\hat{f}$ и $\hat{g}$ — эрмитов, то $(\hat{f} \hat{g})^+ = \hat{g} \hat{f}$. Отсюда следует, что оператор $\hat{f} \hat{g}$ будет эрмитов, только если множители $\hat{f}$ и $\hat{g}$ коммутативны.

§ 5. Непрерывный спектр

Все введенные в §§ 3 и 4 соотношения, описывающие свойства собственных функций дискретного спектра, без труда могут быть обобщены на случай непрерывного спектра собственных значений. Мы перечислим их здесь, не повторяя заново всех соответствующих рассуждений.

Пусть f — физическая величина, обладающая непрерывным спектром. Ее собственные значения мы будем обозначать просто той же буквой f без индекса, а соответствующие собственные функции будем писать как Ψ_f . Подобно тому как произвольная волновая функция Ψ может быть разложена в ряд (3,2) по собственным функциям величины с дискретным спектром, она может быть разложена — на этот раз в интеграл — и по полной системе собственных функций величины с непрерывным спектром. Такое разложение имеет вид

$$\Psi(q) = \int a_f \Psi_f(q) df. \quad (5,1)$$

Коэффициенты разложения

$$a_f = \int \Psi(q) \Psi_f^*(q) dq. \quad (5,2)$$

Поскольку f может принимать непрерывный ряд значений, надо говорить теперь не о вероятности того или иного одного значения, а о вероятности величине иметь значения в бесконечно малом интервале между f и $f+df$. Эта вероятность дается выражением $|a_f|^2 df$, подобно тому как в случае дискретного спектра квадрат $|a_n|^2$ дает вероятность собственного значения f_n . Поскольку сумма вероятностей всех возможных значений f должна быть равна 1, то имеем

$$\int |a_f|^2 df = 1 \quad (5,3)$$

(аналогично соотношению (3,3) для дискретного спектра).

Написанные формулы предполагают определенную нормировку собственных функций Ψ_f . Именно, они должны быть нормированы правилом

$$\int \Psi_f^* \Psi_{f'} dq = \delta(f' - f), \quad (5,4)$$

где справа стоит δ -функция (ее определение и свойства были даны в § 54)¹⁾. Действительно, подставив (5,1) в (5,2), получим равенство

$$a_f = \int a_{f'} \left(\int \Psi_{f'} \Psi_f^* dq \right) df',$$

которое должно выполняться тождественно. При условии (5,4) это требование действительно выполняется, так как по свойствам δ -функции

$$\int a_{f'} \delta(f' - f) df' = a_f.$$

Правило нормировки (5,4) заменяет собой условие (3,13) дискретного спектра. Мы видим, что функции Ψ_f и $\Psi_{f'}$ с $f \neq f'$ по-прежнему взаимно ортогональны. Интегралы же от квадратов $|\Psi_f|^2$ собственных функций непрерывного спектра обращаются в бесконечность. К вопросу о происхождении и смысле этой расходимости мы вернемся в конце § 10.

¹⁾ Дельта-функция была введена в теоретическую физику Дираком.

Если подставить (5,2) в (5,1), то получим

$$\Psi(q) = \int \Psi(q') \left(\int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q) df \right) dq',$$

откуда заключаем, что должно быть ¹⁾

$$\int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q) df = \delta(q - q'). \quad (5,5)$$

Сравнив пару формул (5,1), (5,4) с парой (5,2), (5,5), мы видим, что, с одной стороны, функции $\Psi_f(q)$ осуществляют разложение произвольной функции $\Psi(q)$ с коэффициентами разложения a_f , а, с другой стороны, формулу (5,2) можно рассматривать как совершенно аналогичное разложение функции $a_f \equiv a(f)$ по функциям $\Psi_f^*(q)$, причем роль коэффициентов разложения играет $\Psi(q)$. Функция $a(f)$, как и $\Psi(q)$, вполне определяет состояние системы; о ней говорят как о волновой функции в f -представлении (а о функции $\Psi(q)$ — как о волновой функции в координатном или q -представлении). Подобно тому как $|\Psi(q)|^2$ определяет вероятность системе иметь координаты в заданном интервале dq , так $|a(f)|^2$ определяет вероятность значений величины f в заданном интервале df . Функции же $\Psi_f(q)$ являются, с одной стороны, собственными функциями величины f в q -представлении и, с другой стороны, их комплексно сопряженные функции $\Psi_f^*(q)$ представляют собой собственные функции координаты q в f -представлении.

Существуют такие физические величины, которые обладают в некоторой области своих значений дискретным спектром, а в другой — непрерывным. Для собственных функций такой величины, разумеется, имеют место все те же соотношения, которые были выведены в этом и предыдущих параграфах. Надо только отметить, что полную систему функций образует совокупность собственных функций обоих спектров вместе. Поэтому разложение произвольной волновой функции по собственным функциям такой величины имеет вид

$$\Psi(q) = \sum_n a_n \Psi_n(q) + \int a_f \Psi_f(q) df, \quad (5,6)$$

¹⁾ Аналогичное соотношение может быть, конечно, выведено и для дискретного спектра, где оно имеет вид

$$\sum_n \Psi_n^*(q') \Psi_n(q) = \delta(q - q'). \quad (5,5a)$$

где сумма берется по дискретному, а интеграл — по всему непрерывному спектру.

Примером величины, обладающей непрерывным спектром, является сама координата q . Легко видеть, что соответствующим ей оператором является простое умножение на q . Действительно, поскольку вероятность различных значений координаты определяется квадратом $|\Psi(q)|^2$, то ее среднее значение

$$\bar{q} = \int q |\Psi|^2 dq \equiv \int \Psi^* q \Psi dq.$$

Сравнив это выражение с определением операторов согласно (3,5), мы видим, что ¹⁾

$$\hat{q} = q. \quad (5,7)$$

Собственные функции этого оператора должны определяться, согласно общему правилу, уравнением $q\Psi_{q_0} = q_0\Psi_{q_0}$, где посредством q_0 временно обозначены конкретные значения координаты, в отличие от переменной q . Поскольку это равенство может удовлетворяться либо при $\Psi_{q_0} = 0$, либо при $q = q_0$, то ясно, что удовлетворяющие условию нормировки волновые функции

$$\Psi_{q_0} = \delta(q - q_0). \quad (5,8)$$

§ 6. Предельный переход

Квантовая механика содержит в себе классическую в качестве предельного случая. Возникает вопрос о том, каким образом осуществляется этот предельный переход.

В квантовой механике электрон описывается волновой функцией, определяющей различные значения его координаты; об этой функции нам известно пока лишь, что она является решением некоторого линейного дифференциального уравнения в частных производных. В классической же механике электрон рассматривается как материальная частица, движущаяся по траектории, вполне определяющей ее уравнениями движения. Взаимоотношение, в некотором смысле аналогичное взаимоотношению между квантовой и классической механикой, имеет место в электродинамике

¹⁾ В дальнейшем мы условимся для простоты обозначений писать операторы, сводящиеся к умножению на некоторую величину, просто в виде самой этой величины, без шляпки над буквой.

между волновой и геометрической оптикой. В волновой оптике электромагнитные волны описываются векторами электрического и магнитного полей, удовлетворяющими определенной системе линейных дифференциальных уравнений (уравнений Максвелла). В геометрической же оптике рассматривается распространение света по определенным траекториям — лучам. Подобная аналогия позволяет заключить, что предельный переход от квантовой механики к классической происходит аналогично переходу от волновой к геометрической оптике.

Напомним, каким образом математически осуществляется этот последний переход (см. I § 74). Пусть u — какая-нибудь из компонент поля в электромагнитной волне. Ее можно написать в виде $u = ae^{i\varphi}$ с вещественными амплитудой a и фазой φ (последнюю называют в геометрической оптике эйконалом). Предельный случай геометрической оптики соответствует малым длинам волн, что математически выражается большой величиной изменения φ на малых расстояниях; это означает, в частности, что фазу можно считать большой по своей абсолютной величине.

Соответственно этому исходим из предположения, что предельному случаю классической механики соответствуют в квантовой механике волновые функции вида $\Psi = ae^{i\varphi}$, где a — медленно меняющаяся функция, а φ принимает большие значения. Как известно, в механике траектория частиц может быть определена из вариационного принципа, согласно которому так называемое действие S механической системы должно быть минимальным (принцип наименьшего действия). В геометрической же оптике ход лучей определяется так называемым принципом Ферма, согласно которому должна быть минимальной «оптическая длина пути» луча, т. е. разность его фаз в конце и в начале пути.

Исходя из этой аналогии, мы можем утверждать, что фаза волновой функции в классическом предельном случае должна быть пропорциональна механическому действию S рассматриваемой физической системы, т. е. должно быть $S = \text{const} \cdot \varphi$. Коэффициент пропорциональности называется *постоянной Планка* и обозначается буквой $\hbar$ ¹⁾. Она имеет

¹⁾ Она была введена в физику *Максом Планком* в 1900 г. Постоянная $\hbar$, которой мы пользуемся везде в этой книге, есть, собственно говоря, постоянная Планка h , деленная на 2π (обозначение *Дирака*).

размерность действия (поскольку Φ безразмерно) и равна

$$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек.}$$

Таким образом, волновая функция «почти классической» (или, как говорят, *квазиклассической*) физической системы имеет вид

$$\Psi = ae^{\frac{i}{\hbar} S}. \quad (6,1)$$

Постоянная Планка играет фундаментальную роль во всех квантовых явлениях. Ее относительная величина (по сравнению с другими величинами той же размерности) определяет «степень квантовости» той или иной физической системы.

Переход от квантовой к классической механике, соответствуя большой фазе, может быть формально описан как переход к пределу $\hbar \rightarrow 0$ (подобно тому как переход от волновой к геометрической оптике соответствует переходу к пределу равной нулю длины волны, $\lambda \rightarrow 0$).

Мы выяснили предельный вид волновой функции, но еще остается вопрос о том, каким образом она связана с классическим движением по траектории. В общем случае движение, описываемое волновой функцией, отнюдь не переходит в движение по определенной траектории. Ее связь с классическим движением заключается в том, что если в некоторый начальный момент волновая функция, а с нею и распределение вероятностей координат заданы, то в дальнейшем это распределение будет «перемещаться» так, как это полагается по законам классической механики (см. об этом подробнее в § 26).

Для того чтобы получить движение по определенной траектории, надо исходить из волновой функции особого вида, заметно отличной от нуля лишь в очень малом участке пространства (так называемый *волновой пакет*); размеры этого участка можно стремиться к нулю вместе с $\hbar$. Тогда можно утверждать, что в квазиклассическом случае волновой пакет будет перемещаться в пространстве по классической траектории частицы.

Наконец, квантовомеханические операторы в пределе должны сводиться просто к умножению на соответствующую физическую величину.

§ 7. Матрица плотности

Описание системы с помощью волновой функции соответствует наиболее полному возможному в квантовой механике описанию — в смысле, указанном в конце § 1.

С состояниями, не допускающими такого описания, мы столкнемся, рассмотрев систему, являющуюся частью некоторой большей замкнутой системы. Предположим, что замкнутая система в целом находится в некотором состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(q, x)$, где x обозначает совокупность координат рассматриваемой системы, а q — остальные координаты замкнутой системы. Эта функция, вообще говоря, отнюдь не распадается на произведение функций только от x и только от q , так что система не обладает своей волновой функцией.

Пусть $\hat{f}$ есть некоторая физическая величина, относящаяся к нашей системе. Ее оператор действует поэтому только на координаты x , но не на q . Среднее значение этой величины в рассматриваемом состоянии есть

$$\bar{f} = \iint \Psi^*(q, x) \hat{f} \Psi(q, x) dq dx. \quad (7,1)$$

Введем функцию $\rho(x', x)$, определяемую посредством

$$\rho(x', x) = \int \Psi^*(q, x') \Psi(q, x) dq, \quad (7,2)$$

где интегрирование производится только по координатам q ; ее называют *матрицей плотности* системы. Положив в ней $x = x'$, получим функцию

$$\rho(x, x) = \int |\Psi^*(q, x)|^2 dq, \quad (7,3)$$

определяющую, очевидно, распределение вероятности для координат системы.

С помощью матрицы плотности среднее значение $\bar{f}$ можно написать в виде

$$\bar{f} = \int [\hat{f} \rho(x', x)]_{x'=x} dx. \quad (7,4)$$

Здесь $\hat{f}$ действует в функции $\rho(x', x)$ только на переменные x ; после вычисления результата воздействия надо положить $x' = x$. Мы видим, что, зная матрицу плотности, можно

вычислить среднее значение любой величины, характеризующей систему. Отсюда следует, что с помощью $\rho(x', x)$ можно определить также и вероятности различных значений физических величин системы.

Таким образом, мы приходим к выводу, что состояние системы, не обладающей волновой функцией, может быть описано посредством матрицы плотности ¹⁾. Матрица плотности не содержит координат q , не относящихся к данной системе, хотя, разумеется, по существу зависит от состояния замкнутой системы в целом.

Описание с помощью матрицы плотности является наиболее общей формой квантовомеханического описания систем. Описание же с помощью волновой функции является частным случаем, отвечающим матрице плотности вида $\rho(x', x) = \Psi^*(x') \Psi(x)$. Между этим частным случаем и общим случаем имеется следующее важное различие. Для состояния, обладающего волновой функцией (такое состояние называют иногда *чистым*), всегда существует такая полная система измерительных процессов, которые приводят с достоверностью к определенным результатам. Для состояний же, обладающих лишь матрицей плотности (их называют *смешанными*), не существует полной системы измерений, которые приводили бы к однозначно предсказуемым результатам.

¹⁾ Способ квантовомеханического описания таких состояний был впервые введен независимо Л. Д. Ландау и Ф. Блохом (1927).

Глава II

ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

§ 8. Гамильтониан

Волновая функция Ψ полностью определяет состояние физической системы в квантовой механике. Это значит, что задание этой функции в некоторый момент времени не только описывает все свойства системы в этот момент, но определяет ее поведение также и во все будущие моменты времени — конечно, лишь с той степенью полноты, которая вообще допускается квантовой механикой. Математически это обстоятельство выражается тем, что значение производной $\partial\Psi/\partial t$ от волновой функции по времени в каждый данный момент времени должно определяться значением самой функции Ψ в тот же момент, причем зависимость эта должна быть, согласно принципу суперпозиции, линейной. В наиболее общем виде можно написать

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (8,1)$$

где $\hat{H}$ — некоторый линейный оператор; множитель $i\hbar$ введен здесь с целью, которая выяснится ниже.

Поскольку интеграл $\int \Psi^* \Psi dq$ есть постоянная, не зависящая от времени величина, то имеем

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^* \Psi dq = \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dq + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi dq = 0.$$

Подставив сюда (8,1) и применив во втором интеграле определение транспонированного оператора, пишем (опустив

общий множитель $1/i\hbar$)

$$\begin{aligned} \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq - \int \Psi \hat{H}^* \Psi^* dq &= \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq - \int \Psi^* \tilde{\hat{H}}^* \Psi dq = \\ &= \int \Psi^* (\hat{H} - \hat{H}^+) \Psi dq = 0. \end{aligned}$$

Поскольку это равенство должно выполняться для произвольной функции Ψ , то отсюда следует, что должно быть тождественно $\hat{H} = \hat{H}^+$, т. е. оператор $\hat{H}$ эрмитов.

Выясним, какой физической величине он соответствует. Для этого воспользуемся предельным выражением (6,1) волновой функции и напишем

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi$$

(медленно меняющуюся амплитуду a можно не дифференцировать). Сравнивая это равенство с определением (8,1), мы видим, что в предельном случае оператор $\hat{H}$ сводится к простому умножению на величину $-\partial S/\partial t$. Это значит, что последняя и есть та физическая величина, в которую переходит эрмитов оператор $\hat{H}$.

Но производная $-\partial S/\partial t$ есть не что иное, как функция Гамильтона H механической системы. Таким образом, $\hat{H}$ есть оператор, соответствующий в квантовой механике функции Гамильтона; его называют *гамильтоновским оператором* или, короче, *гамильтонианом* системы. Если вид гамильтониана известен, то уравнение (8,1) определяет волновые функции данной физической системы. Это основное уравнение квантовой механики называют *волновым уравнением*.

§ 9. Дифференцирование операторов по времени

Понятие о производной физической величины по времени не может быть определено в квантовой механике в том смысле, какой оно имеет в классической механике. Действительно, определение производной в классической механике связано с рассмотрением значений величины в два близких, но различных момента времени. Но в квантовой механике величина, измеренная в некоторый момент времени, не имеет в следующие моменты вообще никакого определенного значения; подробнее об этом шла речь в § 1.

Поэтому понятие производной по времени должно быть определено в квантовой механике иным образом. Естественно определить производную $\dot{\hat{f}}$ от величины $\hat{f}$ как величину, среднее значение которой равно производной по времени от среднего значения $\bar{f}$. Таким образом, имеем, по определению,

$$\bar{\dot{\hat{f}}} = \dot{\bar{f}}. \quad (9,1)$$

Исходя из этого определения, нетрудно получить выражение для квантовомеханического оператора $\dot{\hat{f}}$, соответствующего величине $\dot{\bar{f}}$. Пишем

$$\begin{aligned} \bar{\dot{\hat{f}}} = \dot{\bar{f}} &= \frac{d}{dt} \int \Psi^* \hat{f} \Psi dq = \\ &= \int \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \Psi dq + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{f} \Psi dq + \int \Psi^* \hat{f} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dq. \end{aligned}$$

Здесь $\partial \hat{f} / \partial t$ есть оператор, получающийся дифференцированием оператора $\hat{f}$ по времени, от которого $\hat{f}$ может зависеть, как от параметра. Подставляя для производных $\partial \Psi / \partial t$, $\partial \Psi^* / \partial t$ их выражения согласно (8,1), получим

$$\bar{\dot{\hat{f}}} = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \Psi dq + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^* \Psi^*) \hat{f} \Psi dq - \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* \hat{f} (\hat{H} \Psi) dq.$$

Поскольку оператор $\hat{H}$ — эрмитов, то

$$\int (\hat{H}^* \Psi^*) (\hat{f} \Psi) dq = \int \Psi^* \hat{H} \hat{f} \Psi dq;$$

таким образом, имеем

$$\bar{\dot{\hat{f}}} = \int \Psi^* \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{f} - \frac{i}{\hbar} \hat{f} \hat{H} \right) \Psi dq.$$

Поскольку, с другой стороны, должно быть, по определению средних значений, $\bar{\dot{\hat{f}}} = \int \Psi^* \dot{\hat{f}} \Psi dq$, то отсюда видно, что выражение, стоящее в скобках под интегралом, представляет собой искомый оператор:

$$\dot{\hat{f}} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{f} - \hat{f} \hat{H}). \quad (9,2)$$

Если оператор $\hat{f}$ не зависит от времени явно, то $\dot{\hat{f}}$ сводится (с точностью до множителя) к коммутатору оператора $\hat{f}$ с гамильтонианом.

Очень важную категорию физических величин составляют те, операторы которых не зависят явно от времени и, кроме того, коммутативны с гамильтонианом, так что $\dot{\hat{f}}=0$. Такие величины называют *сохраняющимися*. Для них $\bar{\dot{f}}=\dot{\bar{f}}=0$, т. е. $\bar{f}=\text{const}$. Другими словами, среднее значение величины остается постоянным во времени. Можно также утверждать, что если в данном состоянии величина f имеет определенное значение (т. е. волновая функция является собственной функцией оператора $\hat{f}$), то и в дальнейшие моменты времени она будет иметь определенное — то же самое — значение.

§ 10. Стационарные состояния

Гамильтониан замкнутой системы (а также системы, входящей в постоянном — но не в переменном — внешнем поле) не может содержать времени явно. Это следует из того, что по отношению к такой физической системе все моменты времени эквивалентны. Поскольку, с другой стороны, всякий оператор, конечно, коммутативен сам с собой, то мы приходим к выводу, что у систем, не находящихся в переменном внешнем поле, функция Гамильтона сохраняется. Как известно, сохраняющаяся функция Гамильтона называется энергией (см. I § 6). Смысл закона сохранения энергии в квантовой механике состоит в том, что если в данном состоянии энергия имеет определенное значение, то это значение остается постоянным во времени.

Состояния, в которых энергия имеет определенные значения, называются *стационарными состояниями* системы. Они описываются волновыми функциями Ψ_n , являющимися собственными функциями оператора Гамильтона, т. е. удовлетворяющими уравнению $\hat{H}\Psi_n=E_n\Psi_n$, где E_n — собственные значения энергии. Соответственно этому волновое уравнение (8,1) для функции Ψ_n

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = \hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$$

может быть непосредственно проинтегрировано по времени и дает

$$\Psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(q), \quad (10,1)$$

где ψ_n — функция только от координат. Этим определяется зависимость волновых функций стационарных состояний от времени.

Малой буквой ψ мы будем обозначать волновые функции стационарных состояний без временного множителя. Эти функции, а также сами собственные значения энергии определяются уравнением

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (10,2)$$

Стационарное состояние с наименьшим из всех возможных значением энергии называется *нормальным* или *основным состоянием* системы.

Разложение произвольной волновой функции Ψ по волновым функциям стационарных состояний имеет вид

$$\Psi = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(q). \quad (10,3)$$

Квадраты $|a_n|^2$ коэффициентов разложения, как обычно, определяют вероятности различных значений энергии системы.

Распределение вероятностей для координат в стационарном состоянии определяется квадратом $|\Psi_n|^2 = |\psi_n|^2$; оно не зависит от времени. То же самое относится и к средним значениям

$$\bar{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n dq = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_n dq$$

всякой физической величины f (оператор которой не зависит от времени явно).

Как указывалось, оператор всякой сохраняющейся величины коммутативен с гамильтонианом. Это значит, что всякая сохраняющаяся физическая величина может быть измерена одновременно с энергией.

Среди различных стационарных состояний могут быть такие, которые соответствуют одному и тому же собственному значению энергии (или, как говорят, *энергетическому уровню* системы), отличаясь значениями каких-либо других

физических величин. О таких уровнях, которым соответствует по нескольку различных стационарных состояний, говорят как о *вырожденных*. Физически возможность существования вырожденных уровней связана с тем, что энергия, вообще говоря, не составляет сама по себе полной системы физических величин.

В частности, уровни энергии системы, вообще говоря, вырождены, если имеются две сохраняющиеся физические величины f и g , операторы которых не коммутативны. Действительно, пусть ψ есть волновая функция стационарного состояния, в котором, наряду с энергией, имеет определенное значение величина f . Тогда можно утверждать, что функция $\hat{g}\psi$ не совпадает (с точностью до постоянного множителя) с ψ ; противное означало бы, что имеет определенное значение также и величина g , что невозможно, так как f и g не могут быть измерены одновременно. С другой стороны, функция $\hat{g}\psi$ есть собственная функция гамильтониана, соответствующая тому же значению E энергии, что и ψ :

$$\hat{H}(\hat{g}\psi) = \hat{g}\hat{H}\psi = E(\hat{g}\psi).$$

Таким образом, мы видим, что энергии E соответствует более чем одна собственная функция, т. е. уровень вырожден.

Ясно, что любая линейная комбинация волновых функций, соответствующих одному и тому же вырожденному уровню энергии, есть тоже собственная функция того же значения энергии. Другими словами, выбор собственных функций вырожденного значения энергии неоднозначен. Произвольно выбранные собственные функции вырожденного уровня, вообще говоря, не взаимно ортогональны. Надлежащим подбором их линейных комбинаций можно, однако, всегда получить набор взаимно ортогональных (и нормированных) собственных функций.

Спектр собственных значений энергии может быть как дискретным, так и непрерывным. Стационарное состояние дискретного спектра всегда соответствует *финитному* движению системы, т. е. движению, при котором система или какая-либо ее часть не уходит на бесконечность. Действительно, для собственных функций дискретного спектра интеграл $\int |\Psi|^2 dq$, взятый по всему пространству, конечен. Это, во всяком случае, означает, что квадрат $|\Psi|^2$ достаточно

быстро убывает, обращаясь на бесконечности в нуль. Другими словами, вероятность бесконечных значений координат равна нулю, т. е. система совершает финитное движение или, как говорят, находится в *связанном* состоянии.

Для волновых функций непрерывного спектра интеграл $\int |\Psi|^2 dq$ расходится. Квадрат волновой функции $|\Psi|^2$ не определяет здесь непосредственно вероятности различных значений координат и должен рассматриваться лишь как величина, пропорциональная этой вероятности. Расходимость интеграла $\int |\Psi|^2 dq$ всегда бывает связана с тем, что $|\Psi|^2$ не обращается на бесконечности в нуль (или обращается в нуль недостаточно быстро). Поэтому можно утверждать, что интеграл $\int |\Psi|^2 dq$, взятый по области пространства, внешней по отношению к любой сколь угодно большой, но конечной замкнутой поверхности, будет все же расходиться. Это значит, что в рассматриваемом состоянии система (или какая-либо ее часть) находится на бесконечности. Таким образом, стационарные состояния непрерывного спектра соответствуют инфинитному движению системы.

§ 11. Матрицы физических величин

Предположим для удобства, что рассматриваемая система обладает дискретным энергетическим спектром (все получаемые ниже соотношения непосредственным образом обобщаются и на случай непрерывного спектра). Пусть $\Psi = \sum a_n \Psi_n$ есть разложение произвольной волновой функции по волновым функциям стационарных состояний. Если подставить это разложение в определение (3,5) среднего значения некоторой величины f , то получим

$$f = \sum_n \sum_m a_n^* a_m f_{nm}(t), \quad (11,1)$$

где $f_{nm}(t)$ обозначают интегралы

$$f_{nm} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_m dq. \quad (11,2)$$

Совокупность величин $f_{nm}(t)$ со всеми возможными n, m называют *матрицей* величины f , а о каждой из них говорят

как о *матричном элементе*, соответствующем *переходу* из состояния m в состояние n ¹⁾.

Для матричных элементов f_{nm} применяется также обозначение

$$\langle n | f | m \rangle, \quad (11,3)$$

в особенности удобное, когда каждый из индексов надо писать в виде совокупности нескольких букв. Символ (11,3) иногда рассматривают как «составленный» из обозначения величины f и символов $|m\rangle$ и $\langle n|$, обозначающих соответственно начальное и конечное состояния (обозначения *Дирака*).

Зависимость матричных элементов от времени определяется (если оператор $\hat{f}$ не содержит t явно) зависимостью от времени функций Ψ_n . Подставляя для них выражения (10,1), найдем, что

$$f_{nm}(t) = f_{nm} e^{i\omega_{nm}t}, \quad (11,4)$$

где

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (11,5)$$

есть, как говорят, *частота перехода* между состояниями m и n , а величины

$$f_{nm} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_m dq \quad (11,6)$$

составляют не зависящую от времени матрицу величины f , которой обычно и приходится пользоваться.

Матричные элементы производной $\dot{f}$ получают дифференцированием по времени матричных элементов величины f ; это следует непосредственно из того, что среднее значение

$$\bar{f} = \dot{\bar{f}} = \sum_n \sum_m a_n^* a_m \dot{f}_{nm}(t).$$

Ввиду (11,4) имеем, таким образом, для матричных элементов $\dot{f}$

$$\dot{f}_{nm}(t) = i\omega_{nm} f_{nm}(t), \quad (11,7)$$

¹⁾ Матричное представление физических величин было введено *Гейзенбергом* (1925) еще до открытия *Шредингером* волнового уравнения. «Матричная механика» была затем развита *Борном*, *Гейзенбергом* и *Иорданом*.

или (сокращая с обеих сторон временной множитель $e^{i\omega_{nm}t}$) для не зависящих от времени матричных элементов

$$(\hat{f})_{nm} = i\omega_{nm}f_{nm} = \frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)f_{nm}. \quad (11,8)$$

В целях упрощения обозначений в формулах мы выводим ниже все соотношения для не зависящих от времени матричных элементов; в точности такие же соотношения имеют место и для зависящих от времени матриц.

Для матричных элементов комплексно сопряженной с f величины f^* с учетом определения сопряженного оператора получим

$$(f^*)_{nm} = \int \psi_n^* \hat{f}^+ \psi_m dq = \int \psi_n^* \tilde{f}^* \psi_m dq = \int \psi_m \hat{f}^* \psi_n^* dq,$$

т. е.

$$(f^*)_{nm} = (f_{mn})^*. \quad (11,9)$$

Для вещественных физических величин, которые мы обычно только и рассматриваем, имеем, следовательно,

$$f_{nm} = f_{mn}^* \quad (11,10)$$

(f_{mn} стоит вместо $(f_{mn})^*$). Такие матрицы, как и соответствующие им операторы, называют *эрмитовыми*.

Матричные элементы с $n=m$ называют *диагональными*. Эти элементы вообще не зависят от времени, а из (11,10) ясно, что они вещественны. Элемент f_{nn} представляет собой среднее значение величины f в состоянии ψ_n .

Нетрудно получить правило умножения матриц. Для этого заметим предварительно, что имеет место формула

$$\hat{f}\psi_n = \sum_m f_{mn}\psi_m. \quad (11,11)$$

Это есть не что иное, как разложение функции $\hat{f}\psi_n$ по функциям ψ_m с коэффициентами, определяемыми согласно общему правилу (3,14). Имея в виду эту формулу, пишем для результата воздействия на функцию ψ_n произведения двух операторов

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n = \hat{f}\sum_k g_{kn}\psi_k = \sum_k g_{kn}\hat{f}\psi_k = \sum_{k,m} g_{kn}f_{mk}\psi_m.$$

Поскольку, с другой стороны, должно быть

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n = \sum_m (fg)_{mn}\psi_m,$$

то мы приходим к результату, что матричные элементы произведения fg определяются формулой

$$(fg)_{mn} = \sum_k f_{mk} g_{kn}. \quad (11,12)$$

Это правило совпадает с принятым в математике правилом перемножения матриц: строки первой в произведении матрицы перемножаются со столбцами второй.

Задание матрицы эквивалентно заданию самого оператора. В частности, задание матрицы дает, принципиально, возможность определить собственные значения данной физической величины и соответствующие им собственные функции.

Будем рассматривать значения всех величин в некоторый определенный момент времени и разложим произвольную волновую функцию Ψ (в этот момент времени) по собственным функциям гамильтониана, т. е. по не зависящим от времени волновым функциям ψ_m стационарных состояний:

$$\Psi = \sum_m c_m \psi_m, \quad (11,13)$$

где коэффициенты разложения обозначены как c_m . Подставим это разложение в уравнение $\hat{f}\Psi = f\Psi$, определяющее собственные значения и собственные функции величины f . Имеем

$$\sum_m c_m (\hat{f}\psi_m) = f \sum_m c_m \psi_m.$$

Умножим это уравнение с обеих сторон на ψ_n^* и проинтегрируем по dq . Каждый из интегралов $\int \psi_n^* \hat{f}\psi_m dq$ в левой стороне равенства есть соответствующий матричный элемент f_{nm} . В правой же стороне все интегралы $\int \psi_n^* \psi_m dq$ с $m \neq n$ исчезают в силу ортогональности функций ψ_m , а интегралы с $m = n$ равны 1 в силу нормировки функций; таким образом,

$$\sum_m f_{nm} c_m = f c_n$$

или

$$\sum_m (f_{nm} - f \delta_{nm}) c_m = 0. \quad (11,14)$$

Таким образом, мы получили систему алгебраических однородных уравнений первой степени (с неизвестными c_m). Как известно, такая система обладает отличными от нуля решениями лишь при условии обращения в нуль определителя, составленного из коэффициентов в уравнениях, т. е. при условии

$$|f_{nm} - f\delta_{nm}| = 0.$$

Корни этого уравнения (в котором f рассматривается как неизвестное) и представляют собой возможные значения величины f . Совокупность же величин c_m , удовлетворяющих уравнениям (11,14) с f , равным какому-либо из этих значений, определяет соответствующую собственную функцию.

Если в определении (11,6) матричных элементов величины f взять в качестве ψ_n собственные функции этой же величины, то в силу уравнения $\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n$ будем иметь

$$f_{nm} = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_m dq = f_m \int \psi_n^* \psi_m dq.$$

В силу ортогональности и нормировки функций ψ_m это дает $f_{nm} = 0$ при $n \neq m$ и $f_{mm} = f_m$.

Таким образом, оказываются отличными от нуля только диагональные матричные элементы, причем каждый из них равен соответствующему собственному значению величины f ; о матрице, у которой отличны от нуля эти элементы, говорят как о приведенной к *диагональному виду*. В частности, в обычном представлении (с волновыми функциями стационарных состояний в качестве функций ψ_m) диагональна матрица энергии (а также матрицы всех других физических величин, которые имеют в стационарных состояниях определенные значения). Вообще, о матрице величины f , определенной с помощью собственных функций некоторого оператора $\hat{g}$, говорят как о матрице f в представлении, в котором g диагональна. Везде, где это не оговорено особо, под матрицей физической величины мы будем в дальнейшем понимать матрицу в обычном представлении, в котором диагональна энергия. Все, что сказано выше о зависимости матриц от времени, разумеется, только к этому обычному представлению ¹⁾.

¹⁾ Имея в виду диагональность матрицы энергии, легко убедиться в том, что равенство (11,8) есть написанное в матричном виде операторное соотношение (9,2).

§ 12. Импульс

Рассмотрим замкнутую систему частиц. Поскольку все положения такой системы как целого в пространстве эквивалентны, то можно утверждать, что гамильтониан системы не изменится при параллельном переносе системы на произвольное расстояние. Достаточно потребовать выполнения этого условия для произвольного бесконечно малого смещения; тогда оно будет выполняться и для всякого конечного смещения.

Бесконечно малое параллельное смещение на расстояние $\delta \mathbf{r}$ означает преобразование, при котором радиус-векторы $\mathbf{r}_a$ всех частиц (a — номер частицы) получают одинаковое приращение $\delta \mathbf{r}$: $\mathbf{r}_a \rightarrow \mathbf{r}_a + \delta \mathbf{r}$. Произвольная функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ координат частиц при таком преобразовании переходит в функцию

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1 + \delta \mathbf{r}, \mathbf{r}_2 + \delta \mathbf{r}, \dots) &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \delta \mathbf{r} \sum_a \nabla_a \psi = \\ &= \left(1 + \delta \mathbf{r} \sum_a \nabla_a\right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) \end{aligned}$$

(∇_a — оператор дифференцирования по $\mathbf{r}_a$). Выражение

$$1 + \delta \mathbf{r} \sum_a \nabla_a \quad (12,1)$$

можно рассматривать как оператор бесконечно малого переноса, переводящий функцию $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ в функцию $\psi(\mathbf{r}_1 + \delta \mathbf{r}, \mathbf{r}_2 + \delta \mathbf{r}, \dots)$.

Утверждение, что некоторое преобразование не меняет гамильтониана, означает, что если произвести это преобразование над функцией $\hat{H}\psi$, то результат будет таким же, как если произвести его только над функцией ψ и лишь затем применить к ней оператор $\hat{H}$. Математически это может быть записано следующим образом. Пусть $\hat{O}$ есть оператор, производящий рассматриваемое преобразование. Тогда имеем $\hat{O}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(\hat{O}\psi)$, откуда

$$\hat{O}\hat{H} - \hat{H}\hat{O} = 0, \quad (12,2)$$

т. е. гамильтониан должен быть коммутативен с оператором $\hat{O}$.

В данном случае оператором $\hat{O}$ является оператор бесконечно малого переноса (12,1). Поскольку единичный оператор (оператор умножения на 1) коммутативен, конечно, со всяким вообще оператором, а постоянный множитель $\delta \mathbf{r}$ может быть вынесен из-под знака $\hat{H}$, то условие (12,2) сводится здесь к условию

$$\left(\sum_a \nabla_a\right) \hat{H} - \hat{H} \left(\sum_a \nabla_a\right) = 0. \quad (12,3)$$

Как мы уже знаем, коммутативность оператора (не содержащего времени явно) с $\hat{H}$ означает, что соответствующая этому оператору физическая величина сохраняется. Но величина, сохранение которой для замкнутой системы следует из свойства однородности пространства, есть *импульс* системы (ср. I § 7).

Таким образом, соотношение (12,3) выражает собой закон сохранения импульса в квантовой механике; оператор $\sum \nabla_a$ должен соответствовать (с точностью до постоянного множителя) полному импульсу системы, а каждый из членов суммы ∇_a — импульсу отдельной частицы.

Коэффициент пропорциональности между оператором импульса частицы $\hat{\mathbf{p}}$ и оператором ∇ может быть определен с помощью предельного перехода к классической механике. Написав $\hat{\mathbf{p}} = c \nabla$ и воспользовавшись предельным выражением (6,1) для волновой функции, имеем

$$\hat{\mathbf{p}}\Psi = \frac{i}{\hbar} cae^{\frac{i}{\hbar}S} \nabla S = c \frac{i}{\hbar} \Psi \nabla S,$$

т. е. в классическом приближении действие оператора $\hat{\mathbf{p}}$ сводится к умножению на $ic\nabla S/\hbar$. Градиент ∇S есть импульс $\mathbf{p}$ частицы (см. I § 31); поэтому должно быть $c = -i\hbar$.

Таким образом, *оператор импульса* частицы $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ или в компонентах

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (12,4)$$

Легко убедиться в том, что эти операторы, как и должно быть, эрмитовы. Действительно, для произвольных функций $\psi(x)$ и $\phi(x)$, обращающихся на бесконечности в нуль,

имеем

$$\int \varphi \hat{p}_x \psi dx = -i\hbar \int \varphi \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = i\hbar \int \psi \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = \int \psi \hat{p}_x^* \varphi dx,$$

что и является условием эрмитовости оператора.

Поскольку результат дифференцирования функций по двум различным переменным не зависит от порядка дифференцирования, то ясно, что операторы трех компонент импульса коммутативны:

$$\hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_x = 0, \quad \hat{p}_x \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{p}_x = 0, \quad \hat{p}_y \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{p}_y = 0. \quad (12,5)$$

Это значит, что все три компоненты импульса частицы могут одновременно иметь определенные значения.

Найдем собственные функции и собственные значения операторов импульса. Они определяются векторным уравнением

$$-i\hbar \nabla \psi = \mathbf{p} \psi. \quad (12,6)$$

Его решения имеют вид

$$\psi = C e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}} \quad (12,7)$$

(C — постоянная). Одновременное задание всех трех компонент импульса полностью определяет, как мы видим, волновую функцию частицы. Другими словами, величины p_x, p_y, p_z составляют один из возможных полных наборов физических величин. Их собственные значения образуют непрерывный спектр, простирающийся от $-\infty$ до $+\infty$.

Согласно правилу нормировки собственных функций непрерывного спектра (5,4) должно быть

$$\int \psi_{\mathbf{p}'} \psi_{\mathbf{p}}^* dV = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}), \quad (12,8)$$

где интегрирование производится по всему пространству ($dV = dx dy dz$), а $\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$ — трехмерная δ -функция ¹⁾.

¹⁾ Напомним, что δ -функция векторного аргумента определяется как произведение δ -функций от каждой из его компонент.

Интегрирование осуществляется с помощью формулы ¹⁾

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha x} dx = \delta(\alpha). \quad (12,9)$$

Имеем

$$\int \psi_p \psi_p^* dV = C^2 \int e^{\frac{i}{\hbar} (p' - p) r} dV = C^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(p' - p).$$

Отсюда видно, что должно быть $C^2 (2\pi\hbar)^3 = 1$. Таким образом, нормированная функция

$$\psi_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} pr}. \quad (12,10)$$

Разложение произвольной волновой функции частицы $\psi(r)$ по собственным функциям ψ_p оператора ее импульса представляет собой не что иное, как разложение в интеграл Фурье:

$$\psi(r) = \int a(p) \psi_p(r) d^3p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int a(p) e^{\frac{i}{\hbar} pr} d^3p, \quad (12,11)$$

$$d^3p = dp_x dp_y dp_z.$$

Коэффициенты разложения $a(p)$ равны, в соответствии с формулой (5,2),

$$a(p) = \int \psi(r) \psi_p^*(r) dV = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} pr} dV. \quad (12,12)$$

Функцию $a(p)$ можно рассматривать (см. § 5) как волновую функцию частицы в *импульсном представлении*; $|a(p)|^2 d^3p$ есть вероятность импульсу иметь значения в интервале d^3p . Формулы (12,11—12) определяют связь между волновыми функциями в обоих представлениях.

¹⁾ Условный смысл этого равенства состоит в том, что интеграл, стоящий в его левой стороне, обладает всеми свойствами, присущими δ -функции. При $\alpha=0$ интеграл расходится, а при $\alpha \neq 0$ — обращается в нуль как интеграл от периодической знакопеременной функции. Проинтегрировав этот интеграл еще раз по $d\alpha$ по интервалу от некоторого $-L$ до $+L$ (включающему в себя точку $\alpha=0$), получим

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-L}^L e^{i\alpha x} d\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin Lx}{x} dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \xi}{\xi} d\xi = 1.$$

§ 13. Соотношения неопределенности

Выведем правила коммутации между операторами импульса и координат. Поскольку результат последовательного дифференцирования по одной из переменных x , y , z и умножения на другую из них не зависит от порядка этих операций, то

$$\hat{p}_x y - y \hat{p}_x = 0, \quad \hat{p}_x z - z \hat{p}_x = 0 \quad (13,1)$$

и аналогично для $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$.

Для вывода правила коммутации $\hat{p}_x$ с x пишем

$$(\hat{p}_x x - x \hat{p}_x) \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} = -i\hbar \psi.$$

Мы видим, что результат воздействия оператора $\hat{p}_x x - x \hat{p}_x$ сводится к умножению функции на $-i\hbar$; то же самое относится, конечно, к коммутации $\hat{p}_y$ с y и $\hat{p}_z$ с z . Таким образом, имеем ¹⁾

$$\begin{aligned} \hat{p}_x x - x \hat{p}_x &= -i\hbar, & \hat{p}_y y - y \hat{p}_y &= -i\hbar, \\ \hat{p}_z z - z \hat{p}_z &= -i\hbar. \end{aligned} \quad (13,2)$$

Соотношения (13,1—2) показывают, что координата частицы вдоль одной из осей может иметь определенное значение одновременно с компонентами импульса по двум другим осям; координата же и компонента импульса вдоль одной и той же оси не существуют одновременно. В частности, частица не может находиться в определенной точке пространства и в то же время иметь определенный импульс p .

Предположим, что частица находится в некоторой конечной области пространства, размеры которой вдоль трех осей порядка величины Δx , Δy , Δz . Пусть, далее, среднее значение импульса частицы есть p_0 . Математически это означает, что волновая функция имеет вид $\psi = u(\mathbf{r}) e^{i p_0 \mathbf{r} / \hbar}$, где $u(\mathbf{r})$ — функция, заметно отличная от нуля только в указанной области пространства.

Разложим функцию ψ по собственным функциям оператора импульса (т. е. в интеграл Фурье). Коэффициенты $a(\mathbf{p})$ этого разложения определяются интегралами (12,12) от

¹⁾ Эти соотношения, открытые в матричной форме Гейзенбергом в 1925 г., послужили отправной точкой в создании современной квантовой механики.

функций вида $u(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r} / \hbar}$. Для того чтобы такой интеграл был заметно отличен от нуля, периоды осциллирующего множителя $e^{i(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r} / \hbar}$ должны быть не малыми по сравнению с размерами Δx , Δy , Δz области, в которой отлична от нуля функция $u(\mathbf{r})$. Это значит, что $a(\mathbf{p})$ будет заметно отличным от нуля лишь для значений $\mathbf{p}$ таких, что $(p_{0x} - p_x) \Delta x / \hbar \leq 1$, ... Поскольку $|a(\mathbf{p})|^2$ определяет вероятность различных значений импульса, то интервалы значений p_x , p_y , p_z , в которых $a(\mathbf{p})$ отлично от нуля, — не что иное, как те интервалы значений, в которых могут оказаться компоненты импульса частицы в рассматриваемом состоянии. Обозначая эти интервалы посредством Δp_x , Δp_y , Δp_z имеем, таким образом,

$$\Delta p_x \Delta x \sim \hbar, \quad \Delta p_y \Delta y \sim \hbar, \quad \Delta p_z \Delta z \sim \hbar. \quad (13,3)$$

Эти соотношения (так называемые *соотношения неопределенности*) были установлены Гейзенбергом (1927).

Мы видим, что чем с большей точностью известна координата частицы (т. е. чем меньше Δx), тем больше неопределенность Δp_x в значении компоненты импульса вдоль той же оси, и наоборот. В частности, если частица находится в некоторой строго определенной точке пространства ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0$), то $\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = \infty$. Это значит, что все значения импульса при этом равновероятны. Наоборот, если частица имеет строго определенный импульс $\mathbf{p}$, то равновероятны все ее положения в пространстве (это видно и непосредственно из волновой функции (12,7), квадрат модуля которой не зависит вовсе от координат).

§ 14. Момент импульса

В § 12 при выводе закона сохранения импульса мы воспользовались однородностью пространства по отношению к замкнутой системе частиц. Наряду с однородностью пространство обладает также и свойством изотропии — все направления в нем эквивалентны. Поэтому гамильтониан замкнутой системы должен не меняться при повороте всей системы как целого на произвольный угол вокруг произвольной оси. Достаточно потребовать выполнения этого условия для произвольного бесконечно малого поворота.

Пусть $\delta \varphi$ есть вектор бесконечно малого поворота, равный по величине углу $\delta \varphi$ поворота и направленный по оси, вокруг которой производится поворот. Изменения $\delta \mathbf{r}_a$

(радиус-векторов частиц $\mathbf{r}_a$) при таком повороте равны

$$\delta \mathbf{r}_a = [\delta \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{r}_a]$$

(см. I § 9). Произвольная функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ при этом преобразовании переходит в функцию

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1 + \delta \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 + \delta \mathbf{r}_2, \dots) &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \sum_a \delta \mathbf{r}_a \nabla_a \psi = \\ &= \left(1 + \delta \boldsymbol{\varphi} \sum_a [\mathbf{r}_a \nabla_a]\right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots). \end{aligned}$$

Выражение

$$1 + \delta \boldsymbol{\varphi} \sum_a [\mathbf{r}_a \nabla_a] \quad (14,1)$$

можно рассматривать как «оператор бесконечно малого поворота». Тот факт, что бесконечно малый поворот не меняет гамильтониан системы, выражается коммутативностью оператора поворота с оператором $\hat{H}$. Поскольку $\delta \boldsymbol{\varphi}$ есть постоянный вектор, то это условие сводится к соотношению

$$\left(\sum_a [\mathbf{r}_a \nabla_a]\right) \hat{H} - \hat{H} \left(\sum_a [\mathbf{r}_a \nabla_a]\right) = 0, \quad (14,2)$$

выражающему собой некоторый закон сохранения.

Величина, сохранение которой для замкнутой системы следует из свойства изотропии пространства, есть *момент импульса* системы (ср. I § 9). Таким образом, оператор $\sum [\mathbf{r}_a \nabla_a]$ должен соответствовать (с точностью до постоянного множителя) полному моменту импульса движения системы, а каждый из членов суммы $[\mathbf{r}_a \nabla_a]$ — моменту отдельной частицы.

Коэффициент пропорциональности должен быть положен равным $-i\hbar$; тогда выражение для оператора момента частицы $-i\hbar [\mathbf{r} \nabla] = [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}]$ будет в точности соответствовать обычному классическому выражению $[\mathbf{r}\mathbf{p}]$. В дальнейшем мы будем всегда пользоваться моментом, измеренным в единицах $\hbar$. Оператор определенного таким образом момента отдельной частицы мы будем обозначать посредством $\hat{\mathbf{l}}$, а момента всей системы — посредством $\hat{\mathbf{L}}$. Таким образом, оператор момента частицы

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

или в компонентах

$$\hbar \hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \quad \hbar \hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, \quad \hbar \hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x. \quad (14,3)$$

Для системы, находящейся во внешнем поле, момент импульса в общем случае не сохраняется. Однако сохранение момента все же может иметь место при определенной симметрии поля. Так, если система находится в центрально-симметричном поле, то все направления в пространстве, исходящие из центра, эквивалентны, и потому будет сохраняться момент количества движения относительно этого центра. Аналогично в аксиально-симметричном поле сохраняется составляющая момента вдоль оси симметрии. Все эти законы сохранения, имеющие место в классической механике, остаются в силе и в квантовой механике.

Выясним правила коммутации операторов момента с операторами координат и импульсов. Имеем, например,

$$\begin{aligned}\hat{l}_x y - y \hat{l}_x &= \frac{1}{\hbar} (y \hat{p}_z - z \hat{p}_y) y - \frac{1}{\hbar} y (y \hat{p}_z - z \hat{p}_y) = \\ &= -\frac{1}{\hbar} z (\hat{p}_y y - y \hat{p}_y) = iz.\end{aligned}$$

Таким же образом находим другие соотношения:

$$\hat{l}_x x - x \hat{l}_x = 0, \quad \hat{l}_x y - y \hat{l}_x = iz, \quad \hat{l}_x z - z \hat{l}_x = -iy, \quad (14,4)$$

и еще две тройки таких равенств, получающихся из написанных циклической перестановкой координат (и индексов) x, y, z .

Легко убедиться, что такие же правила имеют место для операторов момента и импульса:

$$\begin{aligned}\hat{l}_x \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{l}_x &= 0, \quad \hat{l}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{l}_x = i \hat{p}_z, \\ \hat{l}_x \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{l}_x &= -i \hat{p}_y.\end{aligned} \quad (14,5)$$

С помощью этих формул легко найти правила коммутации для операторов $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ друг с другом. Имеем

$$\begin{aligned}\hbar (\hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_x) &= \hat{l}_x (z \hat{p}_x - x \hat{p}_z) - (z \hat{p}_x - x \hat{p}_z) \hat{l}_x = \\ &= (\hat{l}_x z - z \hat{l}_x) \hat{p}_x - x (\hat{l}_x \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{l}_x) = -iy \hat{p}_x + ix \hat{p}_y = i \hbar \hat{l}_z.\end{aligned}$$

Таким образом,

$$\hat{l}_y \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}_y = i \hat{l}_x, \quad \hat{l}_z \hat{l}_x - \hat{l}_x \hat{l}_z = i \hat{l}_y, \quad \hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_x = i \hat{l}_z. \quad (14,6)$$

В точности такие же соотношения имеют место и для операторов $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ полного момента системы. Действительно,

поскольку операторы моментов различных частиц коммутативны, то, например,

$$\sum_a \hat{l}_{ay} \sum_a \hat{l}_{az} - \sum_a \hat{l}_{az} \sum_a \hat{l}_{ay} = \sum_a (\hat{l}_{ay} \hat{l}_{az} - \hat{l}_{az} \hat{l}_{ay}) = i \sum_a \hat{l}_{ax}.$$

Таким образом,

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i \hat{L}_x, \quad \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i \hat{L}_y, \quad \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i \hat{L}_z. \quad (14,7)$$

Соотношения (14,7) показывают, что три компоненты момента не могут одновременно иметь определенные значения (за исключением только случая, когда все три компоненты одновременно равны нулю — см. ниже). В этом отношении момент существенно отличается от импульса, у которого три компоненты одновременно измеримы.

Из операторов $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ составим оператор квадрата абсолютной величины вектора момента:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (14,8)$$

Этот оператор коммутативен с каждым из операторов $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}^2 &= 0, & \hat{L}^2 \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}^2 &= 0, \\ \hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 &= 0. \end{aligned} \quad (14,9)$$

Действительно, используя (14,7), имеем, например

$$\begin{aligned} \hat{L}_x^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x^2 &= \hat{L}_x (\hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x) + \\ &+ (\hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x) \hat{L}_x = -i (\hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_x), \\ \hat{L}_y^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y^2 &= i (\hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_x), \\ \hat{L}_z^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 &= 0. \end{aligned}$$

Складывая эти равенства, получим последнее из соотношений (14,9).

Физически соотношения (14,9) означают, что квадрат момента (т. е. его абсолютная величина) может иметь определенное значение одновременно с одной из его составляющих.

Вместо операторов $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ часто бывает удобнее пользоваться их комплексными комбинациями

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i \hat{L}_y, \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i \hat{L}_y. \quad (14,10)$$

Легко убедиться прямым вычислением с помощью (14,7), что для этих комбинаций справедливы следующие правила коммутации:

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ \hat{L}_- - \hat{L}_- \hat{L}_+ &= 2\hat{L}_z, \\ \hat{L}_z \hat{L}_+ - \hat{L}_+ \hat{L}_z &= \hat{L}_+, \quad \hat{L}_z \hat{L}_- - \hat{L}_- \hat{L}_z = -\hat{L}_-. \end{aligned} \quad (14,11)$$

Нетрудно также проверить, что

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hat{L}_z. \quad (14,12)$$

Наконец, выпишем часто используемые выражения для оператора момента отдельной частицы в сферических координатах. Вводя последние согласно обычным соотношениям

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta,$$

получим после простого вычисления следующие выражения:

$$\hat{L}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (14,13)$$

$$\hat{L}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (14,14)$$

Подставив их в (14,12), получим оператор квадрата момента частицы в виде

$$\hat{L}^2 = - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]. \quad (14,15)$$

Обратим внимание на то, что это есть (с точностью до множителя) угловая часть оператора Лапласа.

§ 15. Собственные значения момента

Для определения собственных значений проекции момента импульса частицы на некоторое направление удобно воспользоваться выражением для ее оператора в сферических координатах, выбрав полярную ось вдоль рассматриваемого направления. Согласно формуле (14,13) уравнение $\hat{L}_z \psi = l_z \psi$ запишется в виде

$$-i \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = l_z \psi. \quad (15,1)$$

Его решение

$$\psi = f(r, \theta) e^{il_z \varphi},$$

где $f(r, \theta)$ — произвольная функция от r и θ . Для того чтобы функция ψ была однозначной, необходимо, чтобы она была периодична по φ с периодом 2π . Отсюда находим ¹⁾

$$l_z = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (15,2)$$

Таким образом, собственные значения l_z равны положительным и отрицательным целым числам, включая нуль. Зависящий от φ множитель, характерный для собственных функций оператора $\hat{l}_z$, обозначим посредством

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (15,3)$$

Эти функции нормированы так, что

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_{m'}(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}. \quad (15,4)$$

Собственные значения z -компоненты полного момента системы, очевидно, тоже равны положительным и отрицательным целым числам:

$$L_z = M, \quad M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (15,5)$$

(это следует из того, что оператор $\hat{L}_z$ есть сумма коммутативных друг с другом операторов $\hat{l}_z$ для отдельных частиц).

Поскольку направление оси z заранее ничем не выделено, то ясно, что тот же результат получится для L_x , L_y и вообще для составляющей момента по любому направлению, — все они могут принимать лишь целые значения. Этот результат может показаться, на первый взгляд, парадоксальным, особенно если применить его к двум бесконечно близким направлениям. В действительности, однако, надо иметь в виду, что единственная общая собственная функция операторов $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ соответствует одновременным значениям

$$L_x = L_y = L_z = 0;$$

в этом случае вектор момента, а поэтому и его проекция на любое направление равны нулю. Если же хотя бы одно из собственных значений L_x , L_y , L_z отлично от нуля, то

¹⁾ Общепринятое обозначение собственных значений проекции момента буквой m — той же, которой обозначается масса частицы, — фактически не может привести к недоразумениям.

общих собственных функций у соответствующих операторов нет. Другими словами, не существует такого состояния, в котором две или три составляющие момента по различным направлениям имели бы одновременно определенные (отличные от нуля) значения, так что мы можем говорить лишь о целочисленности одной из них.

Стационарные состояния системы, отличающиеся только значением M , обладают одинаковой энергией — это следует уже из общих соображений, связанных с тем, что направление оси z заранее ничем не выделено. Таким образом, энергетические уровни системы с сохраняющимся (отличным от нуля) моментом во всяком случае вырождены ¹⁾.

Перейдем теперь к отысканию собственных значений квадрата момента и покажем, каким образом можно найти эти значения, исходя из одних только правил коммутации (14,7). Обозначим посредством ψ_M волновые функции стационарных состояний с одинаковым значением квадрата L^2 , относящихся к одному вырожденному уровню энергии.

Прежде всего заметим, что поскольку оба направления оси z физически эквивалентны, то для каждого возможного положительного значения $M = +|M|$ существует такое же отрицательное: $M = -|M|$. Обозначим посредством L (целое положительное число) наибольшее возможное значение $|M|$.

Применив оператор $\hat{L}_z \hat{L}_{\pm}$ к собственной функции ψ_M оператора $\hat{L}_z$ и воспользовавшись правилом коммутации (14,11), получим

$$\hat{L}_z \hat{L}_{\pm} \psi_M = \hat{L}_{\pm} \hat{L}_z \psi_M \pm \hat{L}_{\pm} \psi_M = (M \pm 1) \hat{L}_{\pm} \psi_M.$$

Отсюда видно, что функция $\hat{L}_{\pm} \psi_M$ есть (с точностью до нормировочной постоянной) собственная функция, соответствующая значению $M \pm 1$ величины L_z ; мы можем написать

$$\psi_{M+1} = \text{const} \cdot \hat{L}_+ \psi_M, \quad \psi_{M-1} = \text{const} \cdot \hat{L}_- \psi_M. \quad (15,6)$$

Если в первом из этих равенств положить $M = L$, то должно быть тождественно

$$\hat{L}_+ \psi_L = 0, \quad (15,7)$$

¹⁾ Это обстоятельство является частным случаем указанной в § 10 общей теоремы о вырождении уровней при наличии, по крайней мере, двух сохраняющихся величин с некоммутирующими операторами. Здесь такими величинами являются компоненты момента.

поскольку состояний с $M > L$, по определению, нет. Применяя к этому равенству оператор $\hat{L}_-$ и воспользовавшись равенством (14,12), получим

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ \psi_L = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z) \psi_L = 0.$$

Но поскольку ψ_M — общие собственные функции операторов $\hat{L}^2$ и L_z , то

$$\hat{L}^2 \psi_L = L^2 \psi_L, \quad \hat{L}_z^2 \psi_L = L_z^2 \psi_L, \quad \hat{L}_z \psi_L = L \psi_L,$$

так что полученное уравнение дает

$$L^2 = L_z(L + 1). \quad (15,8)$$

Этой формулой определяются искомые собственные значения квадрата момента; число L пробегает все целые положительные значения, включая значение нуль. При заданном значении числа L компонента момента $L_z = M$ может иметь значения

$$M = L, L - 1, \dots, -L, \quad (15,9)$$

т. е. всего $2L + 1$ различных значений. Уровень энергии, соответствующий моменту L , таким образом, $(2L + 1)$ -кратно вырожден; об этом вырождении обычно говорят как о *вырождении по направлениям момента*. Состояние с равным нулю моментом, $L = 0$ (при этом и все его три компоненты равны нулю), не вырождено. Отметим, что волновая функция такого состояния сферически симметрична; это ясно уже из того, что ее изменение при любом бесконечно малом повороте, даваемое выражением $\hat{L}\psi$, обращается в данном случае в нуль.

Мы будем часто говорить для краткости, как это принято, о «моменте L » системы, подразумевая при этом момент с квадратом, равным $L(L + 1)$; момент одной частицы будем обозначать строчной буквой l . О z -компоненте же момента говорят обычно просто как о «проекции момента».

Вычислим матричные элементы величин L_x, L_y для переходов между состояниями с одинаковыми энергией и моментом L , но различными значениями проекции момента M .

Из формул (15,6) видно, что в матрице оператора $\hat{L}_+$ отличны от нуля только элементы, соответствующие переходам $M \rightarrow M + 1$, а в матрице оператора $\hat{L}_-$ — элементы

с $M \rightarrow M-1$. Учитывая это, находим диагональные матричные элементы (для переходов $L, M-1 \rightarrow L, M-1$) в обеих сторонах равенства (14,12) и получаем

$$L(L+1) = (L_-)_{M-1, M} (L_+)_{M, M-1} + M^2 - M.$$

Замечая, что, в силу эрмитовости операторов $\hat{L}_x, \hat{L}_y$,

$$(L_-)_{M-1, M} = (L_+)_{M, M-1}^*,$$

переписываем это равенство в виде

$$|(L_+)_{M, M-1}|^2 = L(L+1) - M(M-1) = (L-M+1)(L+M),$$

откуда

$$\begin{aligned} \langle M | L_+ | M-1 \rangle &= \langle M-1 | L_- | M \rangle = \\ &= \sqrt{(L+M)(L-M+1)} \quad (15,10) \end{aligned}$$

(использован способ обозначения (11,3)). Для отличных от нуля матричных элементов самих величин L_x и L_y отсюда имеем

$$\begin{aligned} \langle M | L_x | M-1 \rangle &= \langle M-1 | L_x | M \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{(L+M)(L-M+1)}, \\ \langle M | L_y | M-1 \rangle &= -\langle M-1 | L_y | M \rangle = \\ &= -\frac{i}{2} \sqrt{(L+M)(L-M+1)}. \quad (15,11) \end{aligned}$$

Обратим внимание на отсутствие диагональных элементов в матрицах величин L_x, L_y . Поскольку диагональный матричный элемент дает среднее значение величины в соответствующем состоянии, то это значит, что в состояниях с определенными значениями L_z средние значения $\bar{L}_x = \bar{L}_y = 0$. Таким образом, если имеет определенное значение проекция момента на какое-либо направление в пространстве, то в этом же направлении лежит и весь вектор $\bar{\mathbf{L}}$.

§ 16. Собственные функции момента

Заданием значений l и m волновая функция частицы не определяется полностью. Это видно уже из того, что выражения для операторов этих величин в сферических координатах содержат только углы θ и φ , так что их собственные функции могут содержать произвольный, зависящий

от r множитель. Мы будем рассматривать здесь только характерную для собственных функций момента угловую часть волновой функции. Обозначим ее как $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ и нормируем условием

$$\int |Y_{lm}|^2 d\omega = 1$$

($d\omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ — элемент телесного угла).

Функции Y_{lm} с различными l или m , как собственные функции для различных собственных значений операторов момента, автоматически оказываются взаимно ортогональными; вместе с условием нормировки это значит, что

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (16,1)$$

Наиболее прямой способ вычисления искомых функций состоит в непосредственном решении задачи об отыскании собственных функций оператора $\hat{I}^2$, написанного в сферических координатах. Уравнение

$$\hat{I}^2 \psi = l(l+1) \psi$$

принимает вид

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + l(l+1) \psi = 0. \quad (16,2)$$

Это уравнение допускает разделение переменных; его решения можно искать в виде

$$Y_{lm} = \Phi_m(\varphi) \Theta_{lm}(\theta), \quad (16,3)$$

где Φ_m — функции (15,3).

Подставив (16,3) в (16,2), получим для функции Θ_{lm} уравнение

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm}}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta_{lm} + l(l+1) \Theta_{lm} = 0. \quad (16,4)$$

Это уравнение хорошо известно из теории шаровых функций. Оно имеет решения, удовлетворяющие условиям конечности и однозначности при целых положительных значениях $l \geq |m|$, в согласии с полученными выше матричным методом собственными значениями момента. Соответствующие решения представляют собой так называемые присоединенные полиномы Лежандра $P_l^m(\cos \theta)$.

Таким образом, угловые волновые функции

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \text{const} \cdot P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (16,5)$$

т. е., с математической точки зрения, представляют собой определенным образом нормированные шаровые функции. Мы не будем выписывать здесь общего выражения для нормировочной постоянной, но приведем явные формулы для нескольких первых ($l=0, 1, 2$) нормированных шаровых функций:

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1, \pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \\ Y_{2, \pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{2, \pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi}. \end{aligned} \quad (16,6)$$

При $m=0$ присоединенные полиномы Лежандра называются просто полиномами Лежандра $P_l(\cos \theta)$. Соответствующие нормированные шаровые функции

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta). \quad (16,7)$$

При $l=0$ (так что и $m=0$) функция (16,7) сводится к постоянной. Другими словами, волновые функции состояний частицы с моментом $l=0$ зависят только от r , т. е. обладают полной шаровой симметрией — в соответствии со сделанным в § 15 общим утверждением. Отметим также, что если в (16,1) одна из шаровых функций есть Y_{00} , то для другой

$$\int Y_{lm} d\omega = 0 \quad (l \neq 0). \quad (16,8)$$

§ 17. Сложение моментов

Рассмотрим систему, состоящую из двух слабо взаимодействующих частей. При полном пренебрежении взаимодействием для каждой из них справедлив закон сохранения момента импульса, а полный момент $\mathbf{L}$ всей системы можно

рассматривать как сумму моментов $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{L}_2$ ее частей. В следующем приближении при учете слабого взаимодействия законы сохранения $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{L}_2$ уже не выполняются строго, но определяющие их квадраты числа L_1 и L_2 остаются «хорошими» квантовыми числами, пригодными для приближенного описания состояния системы.

В связи с рассмотрением таких систем возникает вопрос о законе сложения моментов. Каковы возможные значения L при заданных значениях L_1 и L_2 ? Что касается закона сложения для проекций момента, то он очевиден: из того, что $\hat{L}_z = \hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z}$, следует

$$M = M_1 + M_2. \quad (17,1)$$

Для операторов же квадратов моментов такого простого соотношения нет, и для вывода их «закона сложения» рассуждаем следующим образом.

Если выбрать в качестве полной системы физических величин величины $\mathbf{L}_1^2$, $\mathbf{L}_2^2$, L_{1z} , L_{2z} ¹⁾, то каждое состояние будет определяться значениями чисел L_1 , L_2 , M_1 , M_2 . При заданных L_1 и L_2 числа M_1 , M_2 пробегают соответственно по $2L_1+1$ и $2L_2+1$ значений, так что всего имеется $(2L_1+1)(2L_2+1)$ различных состояний с одинаковыми L_1 , L_2 . Волновые функции состояний в этом описании обозначим как $\Psi_{L_1 L_2 M_1 M_2}$.

Вместо четырех указанных величин в качестве полной системы можно выбрать четыре величины $\mathbf{L}_1^2$, $\mathbf{L}_2^2$, $\mathbf{L}^2$, L_z . Тогда каждое состояние будет характеризоваться значениями чисел L_1 , L_2 , L , M (соответствующие волновые функции обозначим как $\Psi_{L_1 L_2 L M}$). При заданных L_1 и L_2 должно быть, разумеется, по-прежнему $(2L_1+1)(2L_2+1)$ различных состояний, т. е. при заданных L_1 и L_2 пара чисел L , M может пробегать $(2L_1+1)(2L_2+1)$ пар значений. Эти значения можно определить с помощью следующих рассуждений.

Складывая друг с другом различные допустимые значения M_1 и M_2 , мы получим соответствующие значения M ,

¹⁾ И ряд других величин, которые вместе с четырьмя указанными образуют полную систему. Эти остальные величины не играют роли в дальнейших рассуждениях, и для краткости выражений мы о них не говорим вовсе, называя условно полной систему четырех указанных величин.

как это представлено в следующей таблице:

M_1	M_2	M
L_1	L_2	$L_1 + L_2$
L_1	$L_2 - 1$	$L_1 + L_2 - 1$
$L_1 - 1$	L_2	
$L_1 - 1$	$L_2 - 1$	$L_1 + L_2 - 2$
L_1	$L_2 - 2$	
$L_1 - 2$	L_2	

Мы видим, что наибольшее возможное значение M есть $M = L_1 + L_2$, причем ему отвечает одно состояние ϕ (одна пара значений M_1, M_2). Поэтому и наибольшее возможное значение M в состояниях ψ , а следовательно, и наибольшее L есть $M_1 + M_2$. Далее, имеется два состояния ϕ с $M = L_1 + L_2 - 1$. Следовательно, должно быть и два состояния ψ с этим значением M ; одно из них есть состояние с $L = L_1 + L_2$ (и $M = L - 1$), а другое — с $L = L_1 + L_2 - 1$ (причем $M = L$). Для значения $M = L_1 + L_2 - 2$ есть три различных состояния ϕ . Это значит, что, наряду со значениями $L = L_1 + L_2, L_1 + L_2 - 1$, возможно также и значение $L = L_1 + L_2 - 2$.

Эти рассуждения можно продолжать в таком же виде, пока при уменьшении M на 1 увеличивается на 1 число состояний с заданным значением M . Легко сообразить, что это будет иметь место до тех пор, пока M не достигнет значения $|L_1 - L_2|$. При дальнейшем уменьшении M число состояний перестает возрастать, оставаясь равным $2L_2 + 1$ (если $L_2 \leq L_1$). Это значит, что $|L_1 - L_2|$ есть наименьшее возможное значение L .

Таким образом, мы приходим к результату, что при заданных L_1 и L_2 число L может пробегать значения

$$L = L_1 + L_2, L_1 + L_2 - 1, \dots, |L_1 - L_2|, \quad (17,2)$$

всего $2L_2 + 1$ ($L_2 \leq L_1$) различных значений. Легко проверить, что получается действительно $(2L_1 + 1)(2L_2 + 1)$ различных значений пары чисел L, M . При этом существенно, что (если отвлечься от $2L + 1$ различных значений M при заданном L) каждому из возможных значений (17,2) соответствует всего по одному состоянию.

Этот результат можно наглядно изобразить с помощью так называемой *векторной модели*. Если ввести два вектора

L_1 и L_2 с длинами L_1 и L_2 , то значения L изобразятся как целочисленные длины векторов $\mathbf{L}$, получающихся в результате векторного сложения $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{L}_2$; наибольшее $(L_1 + L_2)$ значение L получается при параллельных, а наименьшее $(|L_1 - L_2|)$ — при антипараллельных $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{L}_2$.

В состояниях с определенными значениями моментов L_1 , L_2 и полного момента L имеют определенные значения также и скалярные произведения $\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2$, $\mathbf{L}\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}\mathbf{L}_2$. Легко найти эти значения. Для вычисления $\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2$ пишем $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}}_1 + \hat{\mathbf{L}}_2$ или, возводя в квадрат и перенося члены,

$$2\hat{\mathbf{L}}_1 \hat{\mathbf{L}}_2 = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_1^2 - \hat{\mathbf{L}}_2^2.$$

Заменяя операторы в правой стороне равенства их собственными значениями, получим собственное значение оператора в левой стороне равенства:

$$\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2 = \frac{1}{2} \{L(L+1) - L_1(L_1+1) - L_2(L_2+1)\}. \quad (17,3)$$

Аналогичным образом найдем

$$\mathbf{L}\mathbf{L}_1 = \frac{1}{2} \{L(L+1) + L_1(L_1+1) - L_2(L_2+1)\}. \quad (17,4)$$

Если $\psi_{L_1M_1}^{(1)}$ и $\psi_{L_2M_2}^{(2)}$ — волновые функции двух частей системы, то волновая функция системы в целом (снова при условии пренебрежения взаимодействием частей) есть произведение

$$\varphi_{L_1L_2M_1M_2} = \psi_{L_1M_1}^{(1)} \psi_{L_2M_2}^{(2)}. \quad (17,5)$$

Эти состояния обладают определенными значениями M_1 и M_2 (помимо L_1 , L_2). Состояния же с определенными значениями L , M являются суперпозициями состояний (17,5) с различными значениями пар чисел M_1 , M_2 , совместными с заданным значением $M = M_1 + M_2$. Их волновые функции — линейные комбинации

$$\psi_{L_1L_2LM} = \sum_{M_1, M_2} C_{L_1L_2M_1M_2}^{L_1L_2LM} \varphi_{L_1L_2M_1M_2} \quad (17,6)$$

с определенными коэффициентами C , зависящими от значений всех перечисленных в их индексах квантовых чисел. Эти коэффициенты называют *коэффициентами векторного сложения* или *коэффициентами Клебша — Гордана*.

§ 18. Правила отбора по моменту

Мы видели, что и в классической, и в квантовой механике закон сохранения момента возникает как результат изотропии пространства по отношению к замкнутой системе. Уже в этом проявляется связь момента со свойствами симметрии по отношению к вращениям. Но в квантовой механике эта связь делается в особенности глубокой и становится по существу основным содержанием понятия о моменте, тем более что классическое определение момента частицы как произведения $[r\mathbf{p}]$ теряет здесь свой непосредственный смысл ввиду одновременной неизмеримости векторов момента и импульса.

Мы видели в § 16, что задание значений l и m определяет угловую зависимость волновой функции частицы, а тем самым — все ее свойства симметрии по отношению к вращениям. В наиболее общем виде формулировка этих свойств сводится к указанию закона преобразования волновых функций при поворотах системы координат.

Неизменной ¹⁾ волновая функция ψ_{LM} системы частиц (с заданными значениями L и M) остается лишь при повороте системы координат вокруг оси z . Всякий же поворот, меняющий направление оси z , приводит к тому, что проекция момента на новую ось z уже не будет иметь определенного значения. Это значит, что в новых координатных осях волновая функция превратится, вообще говоря, в суперпозицию (линейную комбинацию) $2L+1$ функций, отвечающих возможным (при заданном L) значениям M . Можно сказать, что при поворотах системы координат $2L+1$ функций ψ_{LM} преобразуются друг через друга ²⁾. Закон этого преобразования (т. е. коэффициенты суперпозиции как функции углов поворота координатных осей) полностью определяется заданием значения L . Таким образом, момент L приобретает смысл квантового числа, классифицирующего состояния системы по их трансформационным свойствам по

¹⁾ С точностью до несущественного фазового множителя.

²⁾ По математической терминологии говорят, что эти функции осуществляют собой так называемые неприводимые представления группы вращений. Число преобразующихся друг через друга функций называют размерностью представления, причем предполагается, что это число не может быть уменьшено никаким выбором каких-либо других линейных комбинаций этих функций.

отношению к вращениям системы координат. Этот аспект понятия момента в квантовой механике в особенности существен в связи с тем, что он не связан непосредственно с явной зависимостью волновых функций от углов; закон их преобразования друг через друга может быть сформулирован сам по себе, без ссылки на эту зависимость.

Покажем, каким образом, с изложенной точки зрения, можно находить *правила отбора* (по моменту) для матричных элементов различных величин, т. е. правила, устанавливающие, для каких переходов матричные элементы могут быть отличны от нуля.

Для этого заметим предварительно, что в чисто условном, математическом смысле понятие о моменте как о классификационном признаке может быть применено не только к волновым функциям, но и к другим физическим величинам. Например, всякой скалярной величине (т. е. величине, вообще не меняющейся при преобразовании координат) «соответствует момент $L=0$ », в том смысле, что при $L=0$ имеем $2L+1=1$, т. е. имеется всего одна «преобразующаяся сама через себя» величина¹⁾. Аналогично векторной величине можно приписать «момент $L=1$ » ($2L+1=3$) в соответствии с тем, что при поворотах системы координат преобразуются друг через друга три независимые компоненты вектора. Если выразить компоненты вектора через сферические углы θ , φ , определяющие его направление, то получим

$$\begin{aligned} A_+ &\equiv A_x + iA_y = A \sin \theta e^{i\varphi} & (M=1), \\ A_- &\equiv A_x - iA_y = A \sin \theta e^{-i\varphi} & (M=-1), \\ A_z &\equiv A \cos \theta & (M=0). \end{aligned} \quad (18,1)$$

Сравнив эти выражения с функциями (16,6) мы видим, что компоненте A_z соответствует «проекция момента $M=0$ », а комплексным комбинациям A_+ и A_- — соответственно $M=1$ и $M=-1$.

Для упрощения и большей наглядности рассуждений будем говорить о величинах, характеризующих состояния одной частицы (свободной или во внешнем центрально-сим-

¹⁾ Во избежание неясностей подчеркнем, что в рассматриваемом аспекте волновые функции ψ_{LM} (с $L \neq 1$) не являются «скалярами»; все $2L+1$ функций ψ_{LM} с различными M надо рассматривать (с этой точки зрения) как «составляющие» одной многокомпонентной величины.

метричном поле). Пусть f — какая-либо скалярная физическая величина. Рассмотрим ее матричные элементы по отношению к состояниям с определенными значениями l и m :

$$\langle n'l'm' | f | nlm \rangle = \int \psi_{l'm'}^* \hat{f} \psi_{lm} dV, \quad (18,2)$$

где n, n' — остальные (помимо l, m) индексы, определяющие состояния частицы.

Трем множителям в подынтегральном выражении ($\psi_{l'm'}^*, \hat{f}$ и ψ_{lm}) можно сопоставить соответственно пары значений «момента и его проекции»: $(l', -m')$, $(0, 0)$, (l, m) (комплексное сопряжение функции меняет знак в показателе множителя $e^{im\phi}$ в (16,5), т. е. как бы меняет знак проекции момента). Сложим эти «моменты» всеми возможными способами в суммарный «момент» и его проекцию (обозначим их через Λ и μ). Тем самым мы выясним трансформационные свойства тех функций, в линейную комбинацию которых может быть, в принципе, разложено подынтегральное выражение в (18,2):

$$\psi_{l'm'}^* \hat{f} \psi_{lm} = \sum_{\Lambda} a_{\Lambda\mu} \psi_{\Lambda\mu} \quad (\mu = m - m'), \quad (18,3)$$

где $a_{\Lambda\mu}$ — постоянные, а $\psi_{\Lambda\mu}$ — функции, которые по своим трансформационным свойствам совпадают с собственными функциями момента. Для решения поставленного вопроса о правилах отбора нет, однако, необходимости в фактическом проведении этого разложения. Достаточно заметить, что при интегрировании по углам обратятся в нуль (в силу свойства (16,8)) все члены суммы, за исключением члена с $\Lambda = \mu = 0$. Поэтому матричный элемент (18,2) может быть отличен от нуля, только если значения $\Lambda = \mu = 0$ действительно будут присутствовать в разложении (18,3). Но при сложении двух моментов l и l' может получиться значение $\Lambda = 0$, только если $l' = l$.

Таким образом, мы приходим к заключению, что матричные элементы скалярной величины могут быть отличны от нуля лишь для переходов без изменения момента и его проекции:

$$l' = l, \quad m' = m. \quad (18,4)$$

Более того, поскольку задание числа m определяет лишь ориентацию системы по отношению к координатным осям, а значение скалярной величины f от ориентации вообще

не зависит, то можно утверждать, что матричные элементы $\langle n'lm|f|nlm\rangle$ не зависят от значения m .

Аналогичным образом можно найти правила отбора для матричных элементов $\langle n'l'm'|A|nlm\rangle$ векторной величины A . Последней приписывается «момент», равный 1. Складывая его с моментом l , получим значения $l+1$, l , $l-1$ (если $l \neq 0$; при $l=0$ в результате сложения может получиться лишь одно значение 1). Последующее же сложение с моментом l' должно привести к суммарному «моменту» $\Lambda=0$, если мы хотим, чтобы интеграл был отличен от нуля. Для этого l' должно совпадать с одним из результатов предыдущего сложения, т. е. допустимы значения

$$l' = l, l \pm 1, \quad (18,5)$$

причем дополнительно запрещены матричные элементы для переходов между состояниями с $l' = l = 0$.

Правила же отбора по проекциям момента m различны для разных компонент вектора. Учитывая (18,1), легко найти следующие правила:

$$\begin{aligned} \text{для } A_+ = A_x + iA_y: \quad M' &= M + 1, \\ \text{для } A_- = A_x - iA_y: \quad M' &= M - 1, \\ \text{для } A_z: \quad M' &= M. \end{aligned} \quad (18,6)$$

Матричные элементы векторной величины от значений M зависят. Можно показать (на чем мы здесь останавливаться не будем), что и эта зависимость имеет универсальный характер, являясь однозначным следствием трансформационных свойств собственных функций момента.

Упомянем еще случай величины, являющийся симметричным тензором второго ранга, A_{ik} . Такой тензор имеет 6 различных компонент. Совокупность этих компонент не представляет, однако, единого целого с точки зрения их трансформационных свойств. Дело в том, что след тензора (т. е. сумма $A_{ii} = A_{xx} + A_{yy} + A_{zz}$) является скаляром; этот скаляр должен быть исключен из числа преобразующихся величин, т. е. надо рассматривать тензор с равным нулю следом. Такой тензор называют *неприводимым*; он имеет 5 независимых компонент и ему можно приписать «момент» $L = 2$ ($2L + 1 = 5$)¹⁾.

¹⁾ Примером такой физической величины может служить электрический квадрупольный момент системы.

Подчеркнем, что хотя мы говорили здесь о матричных элементах для одной частицы, но в действительности все результаты являются следствием общих трансформационных свойств волновых функций, и потому в равной степени справедливы и для любой системы частиц с сохраняющимся моментом.

§ 19. Четность состояния

Наряду с параллельными переносами и поворотами системы координат (инвариантность по отношению к которым выражает соответственно однородность и изотропию пространства) существует еще одно преобразование, оставляющее неизменным гамильтониан замкнутой системы. Это так называемое преобразование *инверсии*, заключающееся в одновременном изменении знака всех координат, т. е. изменении направлений всех осей на обратные; правовинтовая система координат переходит при этом в левовинтовую, и наоборот. Инвариантность гамильтониана по отношению к этому преобразованию выражает собой симметрию пространства по отношению к зеркальным отражениям ¹⁾. В классической механике инвариантность функции Гамильтона по отношению к инверсии не приводит к каким-либо новым законам сохранения. В квантовой же механике ситуация существенно иная.

Введем символический «оператор инверсии» $\hat{P}$ ²⁾, действие которого на волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ заключается в изменении знака координат:

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \quad (19,1)$$

Легко найти собственные значения P этого оператора, определяемые уравнением

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = P\psi(\mathbf{r}). \quad (19,2)$$

Для этого замечаем, что двукратное воздействие оператора инверсии приводит к тождеству — аргументы функции вообще не меняются. Другими словами, имеем $\hat{P}^2\psi = P^2\psi = \psi$,

¹⁾ Инвариантен по отношению к инверсии также и гамильтониан системы частиц, находящихся в центрально-симметричном поле (причем начало координат должно совпадать с центром поля).

²⁾ Обозначение буквой P — от английского слова parity — четность.

т. е. $P^2 = 1$, откуда

$$P = \pm 1. \quad (19,3)$$

Таким образом, собственные функции оператора инверсии либо не меняются вовсе под его воздействием, либо меняют свой знак. В первом случае волновую функцию (и соответствующее состояние) называют *четной*, а во втором — *нечетной*.

Инвариантность гамильтониана по отношению к инверсии (т. е. коммутативность операторов $\hat{P}$ и $\hat{H}$) выражает собой, следовательно, *закон сохранения четности*: если состояние замкнутой системы обладает определенной четностью (т. е. если оно четно или не четно), то эта четность сохраняется со временем¹⁾.

По отношению к инверсии инвариантен также и оператор момента: инверсия меняет знак как координат, так и операторов дифференцирования по ним, а потому операторы (14,3) остаются неизменными. Другими словами, оператор инверсии коммутативен с оператором момента, а это значит, что система может обладать определенной четностью одновременно с определенными значениями момента L и его проекции M .

Для матричных элементов различных физических величин существуют определенные правила отбора по четности.

Рассмотрим сначала скалярные величины. При этом надо различать *истинные скаляры* — не меняющиеся вовсе при инверсии, и *псевдоскаляры* — величины, меняющие знак при инверсии (псевдоскаляром является, например, скалярное произведение аксиального и полярного векторов).

Легко видеть, что для истинно скалярной величины f могут быть отличны от нуля матричные элементы лишь для переходов без изменения четности. Действительно, матричный элемент величины f для перехода между состояниями различной четности есть интеграл

$$f_{ug} = \int \psi_u^* \hat{f} \psi_g dq,$$

¹⁾ Во избежание недоразумений напомним, что речь идет о нерелятивистской теории. В природе существуют взаимодействия (относящиеся к области релятивистской теории), нарушающие сохранение четности — см. § 90.

где функция ψ_g четна, а ψ_u нечетна. При изменении знака всех координат подынтегральное выражение меняет знак; с другой стороны, интеграл, взятый по всему пространству, не может измениться от изменения обозначения переменных интегрирования. Отсюда следует, что $f_{ug} = -f_{ug}$, т. е. $f_{ug} = 0$. Напротив, для псевдоскалярной величины отличной от нуля матричные элементы лишь для переходов между состояниями различной четности.

Аналогичным образом можно получить правила отбора для векторных величин. При этом надо помнить, что обычные, *полярные*, векторы при инверсии меняют знак, а *аксиальные* векторы при этом преобразовании не меняются (таков, например, вектор момента — векторное произведение двух полярных векторов $\mathbf{p}$ и $\mathbf{r}$). Учтя это, найдем, что для полярного вектора отличны от нуля матричные элементы для переходов с изменением четности, а для аксиального вектора — без изменения четности.

Определим четность состояния одной частицы с моментом l . Преобразование инверсии ($x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$) состоит (для сферических координат) в преобразовании

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi. \quad (19,4)$$

Зависимость волновой функции частицы от углов задается собственной функцией момента Y_{lm} (16,5). При замене φ на $\varphi + \pi$ множитель $e^{im\varphi}$ умножается на $(-1)^m$, а при замене θ на $\pi - \theta$ $P_l^m(\cos \theta)$ переходит в $P_l^m(-\cos \theta) = (-1)^{l-m} P_l^m(\cos \theta)$. Таким образом, вся функция умножается на число $(-1)^l$, т. е. четность состояния с данным значением l есть

$$P = (-1)^l. \quad (19,5)$$

Мы видим, что все состояния с четным l — четны, а с нечетным l — нечетны. Четность состояния зависит только от l , но не от m .

Выясним теперь *правило сложения четностей*. Волновая функция Ψ системы, состоящей из двух независимых частей, представляет собой произведение волновых функций Ψ_1 и Ψ_2 этих частей. Ясно поэтому, что если обе последние обладают одинаковой четностью (т. е. обе меняют или обе не меняют свой знак при изменении знака всех координат), то волновая функция всей системы будет четной. Напротив, если Ψ_1 и Ψ_2 обладают различной четностью, то

функция Ψ будет нечетной. Это утверждение можно выразить равенством

$$P = P_1 P_2, \quad (19,6)$$

где P — четность системы в целом, а P_1, P_2 — четности ее частей. Это правило, разумеется, непосредственно обобщается на случай системы, состоящей из произвольного числа невзаимодействующих частей.

В частности, если речь идет о системе частиц, находящихся в центрально-симметричном поле (причем взаимодействие частиц друг с другом можно считать слабым), то четность состояния системы в целом

$$P = (-1)^{l_1 + l_2 + \dots} \quad (19,7)$$

Подчеркнем, что здесь в показателе стоит алгебраическая сумма моментов частиц, вообще говоря, отличная от их «векторной суммы», т. е. момента L системы.

Если замкнутая система распадается на части (под влиянием действующих в ней самой сил), то ее полные момент и четность должны сохраняться. Это обстоятельство может сделать невозможным распад системы, даже если он возможен в энергетическом отношении.

Рассмотрим, например, атом, находящийся в четном состоянии с моментом $L = 0$, причем энергетически он мог бы распасться на свободный электрон и ион в нечетном состоянии с тем же моментом $L = 0$. Легко видеть, что фактически такой распад не может произойти (будет, как говорят, *запрещен*). Действительно, в силу закона сохранения момента, свободный электрон должен был бы тоже обладать равным нулю моментом и потому находиться в четном состоянии ($P = (-1)^0 = 1$), но в этом случае состояние системы «ион + свободный электрон» было бы нечетным, между тем как первоначальное состояние атома было четным.

Глава III

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

§ 20. Уравнение Шредингера

Вид волнового уравнения физической системы определяется ее гамильтонианом, приобретающим в силу этого фундаментальное значение во всем математическом аппарате квантовой механики.

Вид гамильтониана свободной частицы устанавливается уже общими требованиями, связанными с однородностью и изотропией пространства и принципом относительности Галилея. В классической механике эти требования приводят к квадратичной зависимости энергии частицы от ее импульса: $E = p^2/2m$, где постоянная m называется массой частицы (см. I § 4). В квантовой механике те же требования приводят к такому же соотношению для собственных значений энергии и импульса — одновременно измеримых сохраняющихся (для свободной частицы) величин.

Но для того чтобы соотношение $E = p^2/2m$ имело место для всех собственных значений энергии и импульса, оно должно быть справедливым и для их операторов:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2). \quad (20,1)$$

Подставив сюда (12,4), получим гамильтониан свободно движущейся частицы в виде

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad (20,2)$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — оператор Лапласа.

Гамильтониан системы невзаимодействующих частиц равен сумме гамильтонианов каждой из них:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_a \frac{1}{m_a} \Delta_a, \quad (20,3)$$

где индекс a нумерует частицы; Δ_a — оператор Лапласа, в котором дифференцирование производится по координатам a -й частицы.

В классической (нерелятивистской) механике взаимодействие частиц описывается аддитивным членом в гамильтониане — потенциальной энергией взаимодействия $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$, являющейся функцией координат частиц. Прибавлением такой же функции к гамильтониану системы описывается и взаимодействие частиц в квантовой механике:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_a \frac{\Delta_a}{m_a} + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots). \quad (20,4)$$

Первый член можно рассматривать как оператор кинетической энергии, а второй — как оператор потенциальной энергии. Последний сводится к простому умножению на функцию U , и из предельного перехода к классической механике следует, что эта функция должна совпадать с классической потенциальной энергией. В частности, гамильтониан одной частицы, находящейся во внешнем поле,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z), \quad (20,5)$$

где $U(x, y, z)$ — потенциальная энергия частицы во внешнем поле.

Подстановка выражений (20,2—5) в общее уравнение (8,1) дает волновые уравнения для соответствующих систем. Выпишем здесь волновое уравнение для частицы во внешнем поле:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(x, y, z) \Psi. \quad (20,6)$$

Уравнение же (10,2), определяющее стационарные состояния, принимает вид.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + [E - U(x, y, z)] \psi = 0. \quad (20,7)$$

Уравнения (20,6—7) были установлены Эрвином Шредингером в 1926 г. и называются *уравнениями Шредингера*.

Для свободной частицы уравнение (20,7) имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + E \psi = 0. \quad (20,8)$$

Оно имеет конечные во всем пространстве решения при любом положительном значении энергии E . Для состояний с определенными направлениями движения этими решениями являются собственные функции оператора импульса (12,5), причем $E = p^2/2m$. Полные (зависящие от времени) волновые функции таких стационарных состояний имеют вид

$$\Psi = \text{const} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})}. \quad (20,9)$$

Каждая такая функция — *плоская волна* — описывает состояние, в котором частица обладает определенными энергией E и импульсом $\mathbf{p}$. Частота этой волны равна $E/\hbar$, а ее волновой вектор $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ (соответствующую длину волны $\lambda = 2\pi\hbar/p$ называют *де-Бройлевской длиной волны частицы*)¹⁾.

Энергетический спектр свободно движущейся частицы оказывается, таким образом, непрерывным, простираясь от 0 до $+\infty$. Каждое из этих собственных значений (за исключением только значения $E = 0$) вырождено, причем вырождение — бесконечной кратности. Действительно, каждому отличному от нуля значению E соответствует бесконечное множество собственных функций (20,9), отличающихся направлениями вектора $\mathbf{p}$ при одинаковой его абсолютной величине.

§ 21. Плотность потока

В классической механике скорость частицы $\mathbf{v}$ связана с ее импульсом соотношением $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. В квантовой механике такая же связь, как и следовало ожидать, имеет место между соответствующими операторами. В этом легко убедиться, вычислив оператор $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}}/\hat{m}$ по общему правилу дифференцирования операторов по времени (9,2). Используя

¹⁾ Понятие о волне, связанной с частицей, было впервые введено Луи де Бройлем в 1924 г.

выражение (20,5) для гамильтониана, пишем

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\mathbf{r} - \mathbf{r}\hat{H}) = -\frac{i\hbar}{2m} (\Delta\mathbf{r} - \mathbf{r}\Delta).$$

Для определения стоящего здесь коммутатора подействуем им на произвольную функцию ψ :

$$\Delta(\mathbf{r}\psi) - \mathbf{r}(\Delta\psi) = 2(\nabla\psi).$$

Но $-i\hbar\nabla = \hat{\mathbf{p}}$, так что

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}. \quad (21,1)$$

Такие же соотношения будут, очевидно, иметь место и между собственными значениями скорости и импульса и между их средними значениями в любом состоянии.

Скорость, как и импульс частицы, не может иметь определенного значения одновременно с ее координатами. Но скорость, умноженная на бесконечно малый элемент времени dt , определяет смещение частицы за время dt . Поэтому факт несуществования скорости одновременно с координатами означает, что если частица находится в определенной точке пространства в некоторый момент времени, то она не будет иметь определенного положения уже в следующий бесконечно близкий момент времени.

Далее, найдем оператор ускорения. Имеем

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\mathbf{v}} - \hat{\mathbf{v}}\hat{H}) = \frac{i}{m\hbar} (H\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}H) = \frac{1}{m} (U\nabla - \nabla U).$$

И здесь для выяснения смысла получившегося оператора подействуем им на произвольную ψ :

$$U(\nabla\psi) - \nabla(U\psi) = -(\nabla U)\psi.$$

Поэтому находим

$$m\hat{\mathbf{v}} = -\nabla U. \quad (21,2)$$

Это операторное уравнение по форме в точности совпадает с уравнением движения (уравнением Ньютона) классической механики.

Интеграл $\int |\Psi|^2 dV$, взятый по некоторому конечному объему V , представляет собой вероятность нахождения частицы в этом объеме. Вычислим производную от этой

величины по времени. Имеем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V |\Psi|^2 dV &= \int_V \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dV = \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_V (\Psi \hat{H}^* \Psi^* - \Psi^* \hat{H} \Psi) dV. \end{aligned}$$

Подставив сюда

$$\hat{H} = \hat{H}^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z)$$

и используя тождество

$$\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi = \operatorname{div} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi),$$

получим

$$\frac{d}{dt} \int_V |\Psi|^2 dV = - \int_V \operatorname{div} \mathbf{j} dV,$$

где $\mathbf{j}$ обозначает вектор

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi) = \frac{1}{2} (\Psi^* \hat{\nabla} \Psi + \Psi \hat{\nabla}^* \Psi^*). \quad (21,3)$$

Интеграл от $\operatorname{div} \mathbf{j}$ может быть преобразован, согласно теореме Гаусса, в интеграл по замкнутой поверхности S , окружающей объем V ¹⁾:

$$\frac{d}{dt} \int_V |\Psi|^2 dV = - \oint_S \mathbf{j} df. \quad (21,4)$$

Отсюда видно, что вектор $\mathbf{j}$ может быть назван вектором *плотности потока вероятности* или просто *плотности потока*. Интеграл от этого вектора по поверхности есть вероятность того, что в течение единицы времени частица пересечет эту поверхность.

Вектор $\mathbf{j}$ и плотность вероятности $|\Psi|^2$ удовлетворяют уравнению

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (21,5)$$

аналогичному классическому уравнению непрерывности (I § 55).

¹⁾ Как всегда, элемент поверхности df определяется как вектор, равный по величине площади df элемента и направленный по внешней нормали к нему.

Волновая функция свободного движения — плоская волна (20,9) — может быть пронормирована так, чтобы она описывала поток частиц с равной 1 плотностью (поток, в котором через единичную площадку его поперечного сечения проходит в среднем по одной частице в единицу времени). Такая функция:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - pr)}, \quad (21,6)$$

где v — скорость частицы. Действительно, подставив ее в (21,3), получим $j = p/mv$, т. е. единичный вектор в направлении движения.

§ 22. Общие свойства решений уравнения Шредингера

Условия, которым должны удовлетворять решения уравнения Шредингера, имеют весьма общий характер. Прежде всего волновая функция (вместе со своими первыми производными) должна быть однозначной и непрерывной во всем пространстве. Условие непрерывности производных выражает собой требование непрерывности плотности потока.

Если поле $U(x, y, z)$ нигде не обращается в бесконечность, то и волновая функция тоже должна быть конечной во всем пространстве. Это условие должно соблюдаться и в тех случаях, когда U обращается в некоторой точке в $-\infty$, но не слишком быстро¹⁾.

Пусть $U_{\min}$ — минимальное значение функции $U(x, y, z)$. Поскольку гамильтониан есть сумма двух членов — операторов кинетической (T) и потенциальной энергий, то среднее значение энергии в произвольном состоянии равно сумме $\bar{E} = \bar{T} + \bar{U}$. Но все собственные значения оператора $\hat{T}$ (совпадающего с гамильтонианом свободной частицы) положительны; поэтому и среднее значение $\bar{T} \geq 0$. Имея также в виду очевидное неравенство $\bar{U} > U_{\min}$, найдем, что и $\bar{E} > U_{\min}$. Поскольку это неравенство имеет место для любого состояния, то ясно, что оно справедливо и для

¹⁾ Именно, медленнее, чем $-1/r^2$, где r — расстояние до точки. Можно показать, что если U обращается в $-\infty$ быстрее, чем $-1/r^2$, то «нормальное» состояние будет соответствовать частице, находящейся в самой точке $r=0$, т. е. происходит «падение» частицы в эту точку.

всех собственных значений энергии:

$$E_n > U_{\min}. \quad (22,1)$$

Рассмотрим частицу, движущуюся в силовом поле, исчезающем на бесконечности; функцию $U(x, y, z)$, как обычно принято, определим так, чтобы на бесконечности она обращалась в нуль. Легко видеть, что спектр отрицательных собственных значений энергии будет тогда дискретным, т. е. все состояния с $E < 0$ являются связанными. Действительно, в стационарных состояниях непрерывного спектра, соответствующих инфинитному движению, частица находится на бесконечности (см. § 10). Но на достаточно больших расстояниях наличием поля можно пренебречь, и движение частицы может рассматриваться как свободное; при свободном же движении энергия может быть только положительной.

Напротив, положительные собственные значения образуют непрерывный спектр и соответствуют инфинитному движению; при $E > 0$ уравнение Шредингера, вообще говоря, не имеет (в рассматриваемом поле) решений, для которых бы интеграл $\int |\psi|^2 dV$ сходил.

В квантовой механике при финитном движении частица может находиться и в тех областях пространства, в которых $E < U$; вероятность $|\psi|^2$ нахождения частицы хотя и стремится быстро к нулю с увеличением расстояния в глубь такой области, но на всех конечных расстояниях все же отлична от нуля. В этом отношении имеется принципиальное отличие от классической механики, в которой частица вообще не может проникнуть в область, где $U > E$. В классической механике невозможность проникновения в эту область связана с тем, что при $E < U$ кинетическая энергия была бы отрицательной, т. е. скорость — мнимой, что нелепо. В квантовой механике собственные значения кинетической энергии тоже положительны; тем не менее мы не приходим здесь к противоречию, так как если процессом измерения частица локализуется в некоторой определенной точке пространства, то в результате этого же процесса состояние частицы нарушается таким образом, что она вообще перестает обладать какой-либо определенной кинетической энергией.

Проиллюстрируем сказанное примерами одномерного движения. Под таковым подразумевается движение в поле $U(x)$, зависящем только от одной координаты. Движение в направлениях y и z является тогда свободным, а движение вдоль оси x определяется одномерным уравнением Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi = 0. \quad (22,2)$$

В «потенциальной яме» изображенного на рис. 1, а типа движение с энергией $E < 0$ финитно, и соответствующий

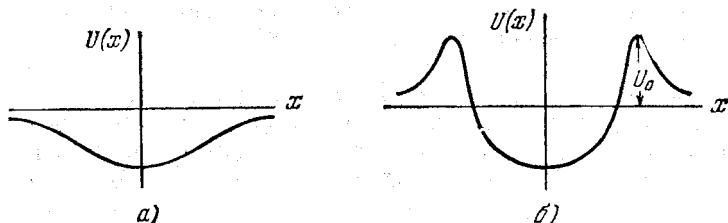


Рис. 1.

спектр уровней энергии дискретен. Энергии же $E > 0$ образуют непрерывный спектр, и движение инфинитно. Определим асимптотический вид волновых функций на больших расстояниях x в этих двух случаях. Поскольку $U \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$, то на больших расстояниях можно пренебречь в уравнении (22,2) полем U по сравнению с E , и тогда

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0. \quad (22,3)$$

При $E > 0$ это есть уравнение одномерного свободного движения. Его общее решение имеет вид

$$\psi = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad (22,4)$$

т. е. представляет собой суперпозицию двух плоских волн, отвечающих движению вправо или влево вдоль оси x . Каждый уровень энергии здесь двукратно вырожден, соответственно двум возможностям движения в противоположных направлениях.

Для энергий же $E < 0$ из двух независимых решений дифференциального уравнения второго порядка (22,2) оказывается допустимым лишь одно, удовлетворяющее граничным условиям: при $x \rightarrow \pm \infty$ волновая функция финитного движения должна стремиться к нулю. На больших расстояниях мы снова приходим к уравнению (22,3), но его решение имеет асимптотический вид:

$$\psi = \text{const} \cdot e^{\mp \kappa x} \quad \text{при} \quad x \rightarrow \pm \infty \quad \left(\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|} \right), \quad (22,5)$$

т. е. экспоненциально затухает вглубь классически недоступной области (второе же решение уравнения (22,3) неограниченно возрастает при $x \rightarrow \pm \infty$).

Если говорить лишь о финитном или инфинитном характере движения, то для поля рассмотренного типа (рис. 1, а) обе возможности осуществляются в классической и квантовой механике в одинаковых случаях (соответственно при $E < 0$ и $E > 0$). Это, однако, будет уже не так в поле, изображенном на рис. 1, б, где потенциальная яма окружена еще «потенциальным барьером» конечной высоты U_0 . Движение при $E < 0$ будет здесь по-прежнему финитным. В классической механике оно было бы финитным для движения внутри ямы также и для энергий $0 < E < U_0$. В квантовой же механике движение будет инфинитным при всех энергиях $E > 0$ — как выше, так и ниже высоты потенциального барьера. Частица (с $E > 0$), находящаяся в некоторый момент времени «внутри ямы», может в дальнейшем «пройти сквозь барьер» и оказаться вне пределов ямы.

Таким образом, квантовая механика допускает инфинитное движение частиц в условиях, когда в классической механике оно было бы исключено. Природа этого явления прохождения через барьер (которое будет еще рассмотрено подробнее в § 28) связана с упомянутым выше обстоятельством, что волновая функция не обращается строго в нуль внутри классически недоступных областей движения.

Уравнение Шредингера в общем виде $\hat{H}\psi = E\psi$ может быть получено из вариационного принципа

$$\delta \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq = 0. \quad (22,6)$$

Ввиду комплексности ψ варьирование по ψ и ψ^* можно

производить независимо. Варьируя по ψ^* , имеем

$$\int \delta\psi^* (\hat{H} - E) \psi \, dq = 0,$$

откуда, ввиду произвольности $\delta\psi^*$, получаем искомое уравнение $\hat{H}\psi = E\psi$. Варьирование по ψ не дает ничего нового: оно приведет лишь к комплексно сопряженному уравнению $\hat{H}^*\psi^* = E\psi^*$.

Методами вариационного исчисления может быть доказан ряд важных теорем об общих свойствах волновых функций стационарных состояний частицы.

Волновая функция ψ_0 нормального состояния не обращается в нуль (или, как говорят, не имеет узлов) ни при каких конечных значениях координат. Другими словами, она имеет одинаковый знак во всем пространстве. Отсюда следует, что волновые функции ψ_n ($n > 0$) других стационарных состояний, ортогональные к ψ_0 , непременно имеют узловые точки (если ψ_n — тоже постоянного знака, то интеграл $\int \psi_0 \psi_n \, dV$ не может обратиться в нуль).

Далее из факта отсутствия узлов у ψ_0 следует, что нормальный энергетический уровень не может быть вырожденным. Действительно, предположим противное, и пусть ψ_0, ψ'_0 — две различные собственные функции, соответствующие уровню E_0 . Всякая линейная комбинация $c\psi_0 + c'\psi'_0$ тоже будет собственной функцией, но, выбирая соответствующим образом постоянные c, c' , всегда можно добиться обращения этой функции в нуль в любой заданной точке пространства, т. е. получить собственную функцию с узлами.

Для одномерного движения справедлива и более далеко идущая так называемая *осцилляционная теорема*: волновая функция $\psi_n(x)$ дискретного спектра, соответствующая $(n+1)$ -му по величине собственному значению E_n , обращается в нуль (при конечных значениях x) n раз.

§ 23. Обращение времени

Уравнение Шредингера для волновых функций стационарных состояний, как и накладываемые на его решения условия — вещественны. Поэтому его решения ψ всегда могут быть выбраны вещественными. При этом собственные функции невырожденных уровней энергии оказываются

вещественными (с точностью до несущественного фазового множителя) автоматически. В самом деле, ψ^* удовлетворяют тому же уравнению, что и ψ , и потому тоже есть собственная функция для того же значения энергии; поэтому, если это значение не вырождено, то ψ и ψ^* должны быть по существу одинаковы, т. е. могут отличаться лишь постоянным фазовым множителем. Волновые же функции, отвечающие одному и тому же вырожденному уровню энергии, не обязательно вещественны, но путем надлежащего выбора их линейных комбинаций всегда можно получить набор вещественных функций.

Полные же (зависящие от времени) волновые функции Ψ определяются уравнением, в коэффициенты которого входит t . Это уравнение, однако, сохраняет свой вид, если в нем заменить t на $-t$ и одновременно перейти к комплексно сопряженному. Поэтому можно всегда выбрать функции Ψ такими, чтобы Ψ и Ψ^* отличались только знаком у времени — результат, известный нам уже из формул (10, 1), (10, 3).

Как известно, уравнения классической механики не меняются при *обращении времени*, т. е. при изменении его знака. В квантовой механике симметрия по отношению к обоим направлениям времени выражается, как мы видим, в неизменности волнового уравнения при изменении знака t и одновременной замене Ψ на Ψ^* .

Подчеркнем, однако, что эта симметрия относится здесь только к волновому уравнению. Она не относится к самому процессу измерения, играющему в квантовой механике фундаментальную роль. Этот процесс имеет в квантовой механике «двуликий» характер — его роли по отношению к прошлому и будущему различны. По отношению к прошлому он подтверждает вероятности различных возможных результатов, предсказываемых по состоянию, созданному предыдущим измерением. По отношению же к будущему он создает новое состояние (мы вернемся еще к этому в § 37). В самой природе квантовомеханического процесса измерения заложена, таким образом, глубокая необратимость.

Эта необратимость имеет важное принципиальное значение. Хотя основные уравнения квантовой механики сами по себе обладают симметрией по отношению к изменению знака времени (в этом отношении квантовая механика не

отличается от классической), но необратимость процесса измерения вносит в квантовые явления физическую неэквивалентность обоих направлений времени, т. е. приводит к появлению различия между будущим и прошедшим.

§ 24. Потенциальная яма

В качестве простого примера одномерного движения рассмотрим движение в прямоугольной потенциальной яме, изображенной на рис. 2 (здесь будет удобнее отсчитывать энергию от дна ямы, а не от значения потенциальной энергии на бесконечности). Нас будут интересовать состояния финитного движения, относящиеся к дискретному спектру энергий $0 < E < U_0$.

В области $0 < x < a$ имеем уравнение Шредингера

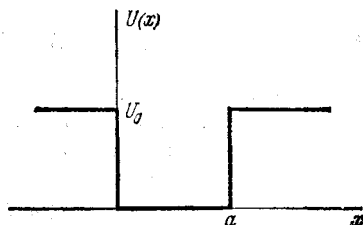


Рис. 2.

$$\psi'' + k^2 \psi = 0, \quad (24,1)$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

(штрих означает дифференцирование по x), а в области вне ямы

$$\psi'' - \kappa^2 \psi = 0, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (24,2)$$

При $x=0$ и $x=a$ решения этих уравнений должны быть «сшиты» друг с другом так, чтобы были непрерывны ψ и ψ' .

Обращающееся на бесконечности в нуль решение уравнения (24,2) есть

$$\psi = \text{const} \cdot e^{\mp \kappa x} \quad (24,3)$$

(знаки $-$ и $+$ в показателе относятся соответственно к областям $x > a$ и $x < 0$). Вместо непрерывности ψ и ψ' на границах ямы удобно потребовать непрерывность ψ и логарифмической производной ψ'/ψ . Учитывая (24,3), получим граничное условие в виде

$$\frac{\psi'}{\psi} = \mp \kappa. \quad (24,4)$$

Мы не станем останавливаться здесь на определении уровней энергии в яме произвольной глубины U_0 (см. задачу 2) и разберем до конца только предельный случай бесконечно высоких стенок.

При $U_0 \rightarrow \infty$ функция (24,3) обращается тождественно в нуль: естественно, что частица вообще не может проникнуть в область, где потенциальная энергия бесконечна. Таким образом, надо найти решение уравнения (22,1) с граничным условием

$$\psi = 0 \quad \text{при} \quad x = 0, a. \quad (24,5)$$

Ищем такое решение в виде «стоячей волны»

$$\psi = c \sin(kx + \delta). \quad (24,6)$$

Условие $\psi = 0$ при $x = 0$ дает $\delta = 0$, после чего условие при $x = a$ дает $\sin ka = 0$, откуда $ka = \pi(n + 1)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$

Таким образом, уровни энергии частицы в яме

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n + 1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (24,7)$$

В частности, энергия основного состояния: $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$. Отметим, что этот результат находится в соответствии с соотношением неопределенности: при неопределенности координаты $\sim a$ неопределенность импульса, а с нею и порядок величины самого импульса $\sim \hbar/a$; соответствующая энергия $\sim (\hbar/a)^2/m$.

Нормированные волновые функции стационарных состояний

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a}. \quad (24,8)$$

В соответствии с осцилляционной теоремой функция $\psi_n(x)$ обращается в нуль внутри области движения n раз (сами границы этой области — в данном случае точки $x = 0$ и $x = a$ — при применении осцилляционной теоремы из подсчета числа нулей исключаются).

В одномерной потенциальной яме любой формы всегда имеется по крайней мере один уровень энергии, — даже если глубина ямы очень мала (см., например, задачу 2). Это свойство, однако, специфично именно для одномерного случая и не имеет места в более реальном случае трехмерной

потенциальной ямы; если глубина $|U|$ такой ямы

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad (24,9)$$

(где a — порядок величины линейных размеров ямы), то в ней нет ни одного дискретного уровня энергии. Другими словами, если яма недостаточно глубока, то в ней нет связанных состояний — частица не может «захватиться» ямой. Подчеркнем, что это свойство имеет чисто квантовый характер, в классической механике частица может совершать финитное движение в любой потенциальной яме. Происхождение этого свойства будет пояснено в § 32 (а в задаче 1 § 30 оно будет показано путем прямого расчета для частного случая сферически-симметричной ямы).

Задачи

1. Определить распределение вероятностей различных значений импульса для нормального состояния одномерного движения частицы, находящейся в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

Решение. Вероятность значений импульса p в интервале dp есть $|a(p)|^2 dp$, где $a(p)$ дается, в одномерном случае, выражением

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^a \psi_0(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx$$

(ср. (12, 12)). Подставив сюда $\psi_0(x)$ из (24,8) и вычислив интеграл, получим искомое распределение вероятностей:

$$|a(p)|^2 = \frac{4\pi\hbar^3 a}{(p^2 a^2 - \pi^2 \hbar^2)^2} \cos^2 \frac{pa}{2\hbar}.$$

2. Определить уровни энергии для потенциальной ямы, изображенной на рис. 2.

Решение. Условие (24,4) на границах ямы дает уравнения

$$k \operatorname{ctg} \delta = -k \operatorname{ctg} (ka + \delta) = \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U_0 - k^2}$$

или

$$\sin \delta = -\sin (ka + \delta) = \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}.$$

Исключив δ , получим трансцендентное уравнение

$$ka = (n+1)\pi - 2 \operatorname{arcsin} \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}} \quad (1)$$

(где $n=0, 1, 2, \dots$, а значения arcsin берутся между 0 и $\pi/2$).

Корни этого уравнения определяют уровни энергии $E = k^2 \hbar^2 / 2m$. Значения n нумеруют уровни в порядке их возрастания. Число уровней (при конечном U_0) конечно.

Уравнение (1) можно написать в более удобном виде, введя переменную ξ и параметр γ согласно

$$\xi = \frac{ka}{2}, \quad \gamma = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{2}{mU_0}}.$$

При четном n получим уравнение

$$\cos \xi = \pm \gamma \xi, \quad (2)$$

причем должны браться те его корни, для которых $\operatorname{tg} \xi > 0$. При нечетном n получим уравнение

$$\sin \xi = \pm \gamma \xi, \quad (3)$$

причем надо брать корни, для которых $\operatorname{tg} \xi < 0$.

В частности, для неглубокой ямы, в которой $U_0 \ll \hbar^2 / ma^2$, имеем $\gamma \gg 1$, и уравнение (3) не имеет корней вовсе. Уравнение же (2) имеет один корень (при знаке $+$ в правой части), равный

$$\xi \approx \frac{1}{\gamma} \left(1 - \frac{1}{2\gamma^2} \right).$$

Таким образом, в этом случае в яме имеется всего один уровень

$$E_0 = \frac{2\xi^2 \hbar^2}{ma^2} \approx U_0 - \frac{ma^2}{2\hbar^2} U_0^2,$$

расположенный вблизи ее «верха».

3. Определить уровни энергии частицы, движущейся в прямоугольной «потенциальной ящике» с длинами ребер a, b, c : $U=0$ внутри этой области и $U=\infty$ вне ее.

Решение. Свободное движение частицы внутри ящика происходит независимо в трех направлениях. Поэтому уровни энергии даются просто суммами трех выражений вида (24,7):

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, \dots$$

Интервалы между уровнями стремятся к нулю при увеличении размеров ящика. Волновые функции стационарных состояний

$$\psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{b} \sin \frac{\pi n_3 z}{c},$$

где оси x, y, z направлены вдоль трех ребер ящика.

§ 25. Линейный осциллятор

Рассмотрим частицу, совершающую одномерные малые колебания (так называемый *линейный осциллятор*). Потенциальная энергия такой частицы равна $m\omega^2 x^2/2$, где ω — в классической механике собственная частота колебаний (см. I § 58). Соответственно этому гамильтониан осциллятора

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (25,1)$$

Поскольку потенциальная энергия обращается в бесконечность при $x \rightarrow \pm\infty$, то частица может совершать лишь финитное движение. В соответствии с этим весь спектр собственных значений энергии будет дискретным.

Определим уровни энергии осциллятора матричным методом¹⁾. Будем исходить из «уравнений движения» в форме (21,2); в данном случае они дают

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0. \quad (25,2)$$

В матричном виде это уравнение гласит

$$(\ddot{x})_{mn} + \omega^2 x_{mn} = 0.$$

Для матричных элементов ускорения имеем, согласно (11,8),

$(\ddot{x})_{mn} = i\omega_{mn}(\dot{x})_{mn} = -\omega_{mn}^2 x_{mn}$. Поэтому получаем

$$(\omega_{mn}^2 - \omega^2) x_{mn} = 0.$$

Отсюда видно, что равны нулю все матричные элементы x_{mn} , за исключением тех, для которых $\omega_{mn} = \pm\omega$. Пронумеруем все стационарные состояния таким образом, чтобы частоты $\pm\omega$ соответствовали переходам $n \rightarrow n \mp 1$, т. е. $\omega_{n, n \mp 1} = \pm\omega$. Тогда отличными от нуля матричными элементами будут лишь $x_{n, n \pm 1}$.

Будем предполагать, что волновые функции ψ_n выбраны вещественными. Поскольку x есть величина вещественная, то такими же будут и все матричные элементы x_{mn} . Условие эрмитовости (11,10) приводит теперь к равенству $x_{mn} = x_{nm}$, т. е. матрица x_{mn} симметрична.

¹⁾ Это было сделано Гейзенбергом (1925) еще до открытия Шредингером волнового уравнения.

Для вычисления отличных от нуля матричных элементов координаты воспользуемся правилом коммутации

$$\hat{x} \hat{x} - \hat{x} \hat{x} = -i \frac{\hbar}{m},$$

написав его в матричном виде:

$$(\dot{x}x)_{mn} - (x\dot{x})_{mn} = -\frac{i\hbar}{m} \delta_{mn}.$$

С помощью правила умножения матриц (11,12) имеем отсюда для $m=n$

$$i \sum_l (\omega_{nl} x_{nl} x_{ln} - x_{nl} \omega_{ln} x_{ln}) = 2i \sum_l \omega_{nl} x_{nl}^2 = -i \frac{\hbar}{m}.$$

В этой сумме отличны от нуля только члены с $l=n\pm 1$, так что получаем

$$(x_{n+1, n})^2 - (x_{n, n-1})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}. \quad (25,3)$$

Из этого равенства заключаем, что величины $(x_{n+1, n})^2$ образуют арифметическую прогрессию, не ограниченную сверху, но непременно ограниченную снизу, так как в ней могут содержаться только положительные члены. Поскольку мы пока установили только относительное расположение номеров состояний n , но не их абсолютные значения, то мы можем произвольно выбрать значение n , соответствующее первому — нормальному — состоянию осциллятора. Положим его равным нулю. Соответственно этому $x_{0, -1}$ надо считать тождественно равным нулю, и последовательное применение уравнений (25,3) с $n=0, 1, 2, \dots$ приводит к результату

$$(x_{n, n-1})^2 = \frac{n\hbar}{2m\omega}.$$

Таким образом, окончательно получаем следующее выражение для отличных от нуля матричных элементов координаты:

$$x_{n, n-1} = x_{n-1, n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}. \quad (25,4)$$

Матрица оператора $\hat{H}$ диагональна и матричные элементы H_{nn} представляют собой искомые собственные значения

энергии E_n осциллятора. Для их вычисления пишем

$$\begin{aligned} H_{nn} = E_n &= \frac{m}{2} [(\dot{x}^2)_{nn} + \omega^2 (x^2)_{nn}] = \\ &= \frac{m}{2} \left[\sum_l i\omega_{nl} x_{nl} i\omega_{ln} x_{ln} + \omega^2 \sum_l x_{nl} x_{ln} \right] = \\ &= \frac{m}{2} \sum_l (\omega^2 + \omega_{nl}^2) x_{ln}^2. \end{aligned}$$

В сумме по l отличны от нуля только члены с $l=n\pm 1$; подставляя (25,4), получаем

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (25,5)$$

Таким образом, уровни энергии осциллятора расположены через равные интервалы $\hbar\omega$. Энергия нормального состояния ($n=0$) равна $\hbar\omega/2$; подчеркнем, что она оказывается отличной от нуля.

Результат (25,5) можно получить и путем решения уравнения Шредингера. Это уравнение для осциллятора имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad (25,6)$$

Здесь удобно ввести вместо координаты x безразмерную переменную ξ согласно соотношению

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \quad (25,7)$$

Тогда получим уравнение

$$\psi'' + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \psi = 0 \quad (25,8)$$

(здесь штрих означает дифференцирование по ξ).

При больших ξ можно опустить $2E/\hbar\omega$ по сравнению с ξ^2 ; уравнение $\psi'' = \xi^2 \psi$ имеет асимптотические интегралы $\psi = e^{\pm \xi^3/2}$ (дифференцирование этой функции действительно дает, при пренебрежении членами более низкого порядка по ξ , $\psi'' = \xi^2 \psi$). Поскольку волновая функция ψ должна оставаться при $\xi = \pm\infty$ конечной, то в показателе должен быть выбран знак минус. В связи с этим естественно сделать

в уравнении (25,8) подстановку

$$\psi = e^{-\xi^2/2} \chi(\xi). \quad (25,9)$$

Для функции $\chi(\xi)$ получаем уравнение

$$\chi'' - 2\xi\chi' + 2n\chi = 0, \quad (25,10)$$

где обозначено

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n.$$

Функция $\chi(\xi)$ должна быть конечной при всех конечных ξ , а при $\xi \rightarrow \pm\infty$ может обращаться в бесконечность не быстрее конечной степени ξ (так, чтобы функция ψ обращалась в нуль).

Будем искать решение уравнения (25,10) в виде ряда

$$\chi = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s. \quad (25,11)$$

Подставив его в уравнение, получим

$$\sum_{s=2}^{\infty} a_s s(s-1) \xi^{s-2} - 2 \sum_{s=0}^{\infty} a_s s \xi^s + 2n \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s = 0.$$

В первой сумме произведем переобозначение индекса суммирования, заменив s на $s+2$. Тогда

$$\sum_{s=0}^{\infty} [a_{s+2}(s+1)(s+2) + 2(n-s)a_s] \xi^s = 0.$$

Для тождественного выполнения этого равенства должны обращаться в нуль коэффициенты при каждой из степеней ξ . Отсюда находим рекуррентное соотношение

$$a_{s+2} = -\frac{2(n-s)}{(s+1)(s+2)} a_s, \quad (25,12)$$

связывающее коэффициенты последовательных членов в ряде (25,11). Мы видим, прежде всего, что ряд содержит степени ξ одинаковой четности. Для того чтобы выполнялось поставленное выше условие, этот ряд должен содержать лишь члены конечных степеней, т. е. должен оборваться при некотором конечном s . Из (25,12) видно, что для этого n должно быть целым положительным числом: тогда ряд оборвется на члене степени $s=n$, т. е. сведется к полиному

степени n . Тем самым мы возвращаемся к уже известному нам результату (25,5) для собственных значений энергии.

Выпишем в явном виде волновую функцию лишь для основного состояния осциллятора. При $n=0$ полином сводится к константе. Определив ее так, чтобы волновая функция удовлетворяла условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(x) dx = 1,$$

получим

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (25.13)$$

Как и следовало, эта функция не имеет нулей при конечных x .

Задача

Определить распределение вероятностей различных значений импульса в нормальном состоянии осциллятора.

Решение. Аналогично задаче I § 24, вычисляем интеграл

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx.$$

Подстановкой $x + ip/m\omega = z$ он приводится к интегралу Пуассона и получаем

$$|a(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi m\hbar\omega}} \exp\left(-\frac{p^2}{m\hbar\omega}\right).$$

§ 26. Квазиклассическая волновая функция

Если де-бройлевские длины волн частиц малы по сравнению с характеристическими размерами, определяющими условия данной задачи, то свойства системы близки классическим. В § 6 уже был указан общий вид, который имеют волновые функции в таких *квазиклассических* случаях, а в §§ 12 и 14 этот вид был использован для установления квантовомеханических операторов основных физических величин. Проследим теперь более подробно, каким образом происходит в уравнении Шредингера предельный переход к квазиклассическому случаю.

В § 6 было отмечено, что предельный переход от квантовой к классической механике есть, с формальной точки зрения, переход к пределу $\hbar \rightarrow 0$. В квазиклассическом случае, следовательно, можно рассматривать $\hbar$ как малый параметр, а выражение

$$\Psi = ae^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (26,1)$$

(в котором величины a и S предполагаются не зависящими от $\hbar$) — как начало разложения волновой функции по степеням этого параметра. Если представить выражение (26,1) в виде $\exp\{(iS + \hbar \ln a)/\hbar\}$, то мы увидим, что оно соответствует двум первым членам разложения экспоненты. Поэтому и в последующих вычислениях надо сохранять лишь члены первых двух степеней по $\hbar$.

Будем говорить, для простоты, об одной частице во внешнем поле. Подставив (26,1) в уравнение Шредингера (20,6) произведя дифференцирования и сохранив лишь члены первых двух степеней по $\hbar$, получим

$$a \frac{\partial S}{\partial t} - i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m} (\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m} a \Delta S - \frac{i\hbar}{m} \nabla S \nabla a + Ua = 0. \quad (26,2)$$

Члены нулевой и первой степени по $\hbar$ должны обращаться в нуль по отдельности. Отсюда находим два уравнения:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + U = 0, \quad (26,3)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m} \Delta S + \frac{1}{m} \nabla S \nabla a = 0. \quad (26,4)$$

Первое из них есть, как и следовало, уравнение Гамильтона — Якоби для действия частицы S (см. I § 31). Уравнение же (26,4) после умножения на $2a$ может быть переписано в виде

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \operatorname{div} \left(a^2 \frac{\nabla S}{m} \right) = 0. \quad (26,5)$$

Это уравнение имеет наглядный физический смысл. Квадрат $|\Psi|^2 = a^2$ есть плотность вероятности нахождения частицы в пространстве; $\nabla S/m = \mathbf{p}/m$ есть классическая скорость частицы $\mathbf{v}$. Поэтому уравнение (26,5) есть не что иное, как уравнение непрерывности, показывающее, что плотность вероятности «перемещается» по законам классической механики с классической скоростью $\mathbf{v}$ в каждой точке.

Для стационарных состояний, т. е. при заданной энергии E , действие

$$S = -Et + S_0(x, y, z), \quad (26,6)$$

где S_0 — функция координат (так называемое «укороченное действие»), удовлетворяющая уравнению

$$\frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2 + U = E. \quad (26,7)$$

Амплитуда же волновой функции a стационарных состояний не зависит от времени и удовлетворяет уравнению

$$\operatorname{div}(a^2 \nabla S) = 0. \quad (26,8)$$

Выпишем квазиклассическую функцию стационарных состояний в раскрытом виде для случая одномерного движения частицы в поле $U(x)$. В уравнении (26,7) имеем тогда $(\nabla S_0)^2 = (dS_0/dx)^2$, и его решение

$$S_0 = \pm \int p dx, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - U)}. \quad (26,9)$$

Подынтегральное выражение $p(x)$ представляет собой не что иное, как классический импульс частицы, выраженный в функции от координаты. Из (26,8) имеем теперь

$$\frac{d}{dx}(a^2 p) = 0, \quad a^2 p = \text{const},$$

так что $a = \text{const}/\sqrt{p}$. Таким образом, получаем общее решение уравнения Шредингера в виде

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p dx}, \quad (26,10)$$

где C_1, C_2 — постоянные коэффициенты.

Наличие множителя $1/\sqrt{p}$ в волновой функции допускает простое истолкование. Вероятность нахождения частицы в точках с координатами между x и $x+dx$ определяется $|\psi|^2$, т. е. в основном пропорциональна $1/p$. Это как раз то, что и следовало ожидать для «квазиклассической частицы», поскольку при классическом движении время, проводимое частицей на отрезке dx , обратно пропорционально скорости (или импульсу) частицы.

В «классически недоступных» участках пространства, где $E < U(x)$, функция $p(x)$ — чисто мнимая, так что по-

казатели вещественны. Волновую функцию в этих областях напомним в виде

$$\psi = \frac{C'_1}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p| dx} + \frac{C'_2}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int |p| dx}. \quad (26,11)$$

Выясним более точно условие применимости полученных результатов. Именно, в уравнении (26,2) члены, содержащие $\hbar$, должны быть действительно малы по сравнению с членами без $\hbar$. Сравним, например, члены

$$\begin{aligned} \frac{a}{2m} (\nabla S)^2 &= \frac{a}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 = \frac{a}{2m} p^2, \\ \frac{i\hbar a}{2m} \Delta S &= \frac{i\hbar a}{2m} \frac{d^2 S}{dx^2} = \frac{i\hbar a}{2m} \frac{dp}{dx}. \end{aligned}$$

Условие малости второго по сравнению с первым: $(\hbar/p^2) |dp/dx| \ll 1$ или

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad (26,12)$$

где $\lambda = \lambda/2\pi$, а $\lambda(x) = 2\pi\hbar/p(x)$ — де-бройлевская длина волны частицы, выраженная как функция от x с помощью классической функции $p(x)$. Таким образом, мы получили количественное условие квазиклассичности — длина волны частицы должна мало меняться на протяжении расстояний порядка ее самой. Выведенные здесь формулы становятся неприменимыми в тех областях пространства, где это условие не выполняется.

Квазиклассическое приближение заведомо неприменимо вблизи *точек поворота*, т. е. вблизи тех точек, в которых частица, согласно классической механике, остановилась бы, после чего начала бы двигаться в обратном направлении. Эти точки определяются равенством $p(x)=0$. При $p \rightarrow 0$ де-бройлевская длина волны стремится к бесконечности и во всяком случае не может считаться малой.

§ 27. Правило квантования Бора — Зоммерфельда

Полученные в предыдущем параграфе формулы позволяют вывести условие, определяющее квантовые уровни энергии в квазиклассическом случае. Для этого рассмотрим финитное одномерное движение частицы в потенциальной

яме; классически доступная область $a \leq x \leq b$ ограничена двумя точками поворота (рис. 3)¹⁾.

Граничные условия для волновой функции состоят в требовании, чтобы она затухала вглубь каждой из двух классически недоступных областей I и III, обращаясь в нуль

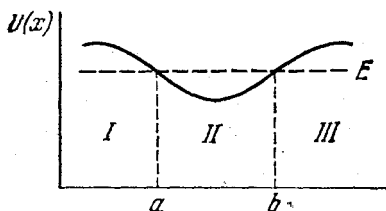


Рис. 3.

при $x \rightarrow \pm\infty$. Мы знаем также, что в этих областях общее решение уравнения Шредингера имеет вид (26,11), а в области II — вид (26,10). Из этих условий можно было бы определить постоянные коэффициенты в этих решениях для каждой из областей

I — III, производя их «сшивку» друг с другом на границах — в точках $x=a$ и $x=b$. Но непосредственное осуществление такой «сшивки» невозможно в связи с тем, что как раз вблизи этих точек квазиклассическое приближение (в котором вычислены функции (26,10—11)) становится неприменимым.

Это затруднение отпадает, если ограничиться первым, наиболее грубым приближением. Оно состоит в том, что граничные условия обращения волновой функции в нуль на бесконечности заменяются условием обращения в нуль уже в точках $x=a$ и $x=b$.

В классическом пределе эти точки являются абсолютными границами движения, и частица вообще не проникает за них. В квазиклассическом приближении, хотя частица и может проникнуть в классически недоступные области, но волновые функции затухают в них очень быстро; это обстоятельство и является основанием для указанной замены граничных условий.

¹⁾ В классической механике в таком поле частица совершала бы периодическое движение с периодом движения от точки a до b и обратно:

$$T = 2 \int_a^b \frac{dx}{v} = 2m \int_a^b \frac{dx}{p}$$

(v — скорость частицы).

Граничное условие $\psi=0$ при $x=a$ приводит для волновой функции в области II к выражению

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx. \quad (27,1)$$

Но таким же образом, поставив условие $\psi=0$ в точке $x=b$, мы получили бы

$$\psi = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin \frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx.$$

Для того чтобы эти два выражения совпадали во всей области, сумма их фаз (которая есть величина постоянная) должна быть целым кратным от π :

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx = n\pi \quad (27,2)$$

(причем $C=(-1)^n C'$). Иначе можно написать

$$\oint p dx = 2\pi\hbar n, \quad (27,3)$$

где интеграл взят по полному периоду классического движения частицы (от a к b и обратно). Это и есть условие, определяющее в квазиклассическом случае стационарные состояния частицы. Оно соответствует *правилу квантования Бора — Зоммерфельда* старой квантовой теории.

Поскольку в квазиклассическом приближении $\hbar$ играет роль малого параметра, то выражение в левой стороне равенства (27,2) — большая величина. То же самое относится, следовательно, и к целому числу n . Фаза волновой функции (27,1) меняется от 0 в точке $x=a$ до $n\pi$ в точке $x=b$, так что внутри этого интервала синус обращается в нуль $n-1 \approx n$ раз. Таким образом, целое число n определяет число нулей волновой функции. Согласно осцилляционной теореме (§ 22) оно тем самым играет роль квантового числа, нумерующего последовательные квантовые уровни энергии ¹⁾.

¹⁾ Более точное исследование, использующее точные (не квазиклассические) решения уравнения Шредингера вблизи точек поворота, приводит к замене целого числа n в (27,2—3) на $n + \frac{1}{2}$. Это же исследование показывает, что число нулей волновой функции на конечных расстояниях во всей области движения в точности совпадает с n .

Тот факт, что квазиклассическому приближению отвечает большое значение квантового числа n , имеет простое наглядное происхождение. Очевидно, что расстояние между соседними нулями волновой функции совпадает по порядку величины с де-бройлевской длиной волны. При больших n это расстояние мало ($\sim (b-a)/n$), так что длина волны мала по сравнению с размерами области движения.

Исходя из правил квантования (27,3), можно выяснить общий характер распределения уровней в энергетическом спектре. Пусть ΔE есть расстояние между двумя соседними уровнями, т. е. уровнями с отличающимися на единицу квантовыми числами n . Поскольку ΔE мало (при больших n) по сравнению с самой энергией уровней, то на основании (27,3) можно написать

$$\Delta E \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = 2\pi\hbar.$$

Но для классического движения производная $\partial E/\partial p$ есть скорость частицы v , так что

$$\oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \oint \frac{dx}{v} = T.$$

Поэтому получаем

$$\Delta E = \frac{2\pi}{T} \hbar = \hbar\omega. \quad (27,4)$$

Таким образом, расстояние между двумя соседними уровнями оказывается равным $\hbar\omega$. Для целого ряда соседних уровней (разность номеров n которых мала по сравнению с самими n) соответствующие частоты ω можно приближенно считать одинаковыми. Поэтому мы приходим к выводу, что в каждом небольшом участке квазиклассической части спектра уровни расположены эквидистантно через одинаковые интервалы $\hbar\omega$. Этот результат, впрочем, можно было ожидать заранее, так как в квазиклассическом случае частоты, соответствующие переходам между различными уровнями энергии, должны быть целыми кратными классической частоты ω .

Интересно проследить, во что переходят в классическом пределе матричные элементы какой-либо физической величины f . Для этого исходим из того, что среднее значение $\bar{f}$ в некотором квантовом состоянии в пределе должно перейти

просто в классическое значение этой величины, если только само состояние в пределе дает движение частицы по определенной траектории. Такому состоянию соответствует волновой пакет (см. § 6), получающийся суперпозицией ряда стационарных состояний с близкими значениями энергии. Волновая функция такого состояния имеет вид

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n,$$

где коэффициенты a_n заметно отличны от нуля только в некотором интервале Δn значений квантового числа n , таком, что $1 \ll \Delta n \ll n$; числа n предполагаются большими соответственно квазиклассичности стационарных состояний. Среднее значение $\bar{f}$ равно, по определению,

$$\bar{f} = \int \Psi^* \hat{f} \Psi dx = \sum_n \sum_m a_m^* a_n f_{mn} e^{i\omega_{mn}t},$$

или, заменив суммирование по n, m суммированием по n и разности $s = m - n$,

$$\bar{f} = \sum_n \sum_s a_{n+s}^* a_n f_{n+s, n} e^{i\omega_{st}},$$

где написано $\omega_{mn} = s\omega$ в соответствии с (27,4).

Матричные элементы f_{mn} , вычисленные с помощью квазиклассических волновых функций, быстро падают по величине с увеличением разности $m - n$, являясь в то же время медленно меняющимися функциями самого числа n (при заданном $m - n$). Ввиду этого приближенно можно написать

$$\bar{f} = \sum_n \sum_s a_n^* a_n f_s e^{i\omega_{st}} = \sum_n |a_n|^2 \sum_s f_s e^{i\omega_{st}},$$

где введено обозначение

$$f_s = f_{\bar{n}+s, \bar{n}},$$

а $\bar{n}$ есть некоторое среднее значение квантового числа в интервале Δn . Но $\sum_n |a_n|^2 = 1$; поэтому

$$\bar{f} = \sum_s f_s e^{i\omega_{st}}. \quad (27,5)$$

Получившаяся сумма имеет вид обычного ряда Фурье. Поскольку $\bar{f}$ должно в пределе совпадать с классической

величиной $f(t)$, то мы приходим к результату, что матричные элементы f_{mn} в пределе переходят в компоненты f_{m-n} разложения классической функции $f(t)$ в ряд Фурье.

Соотношение (27,3) можно истолковать еще и другим образом. Интеграл $\oint p dx$ есть площадь, охватываемая замкнутой классической фазовой траекторией частицы (т. е. кривой в плоскости p, x — фазовом пространстве частицы). Разделив эту площадь на клетки площадью $2\pi\hbar$ каждая, мы получим всего n клеток. Но n есть число квантовых состояний с энергиями, не превышающими заданного ее значения (соответствующего рассматриваемой фазовой траектории). Таким образом, мы можем сказать, что в квазиклассическом случае каждому квантовому состоянию соответствует клетка в фазовом пространстве площадью в $2\pi\hbar$. Иначе, число состояний, отнесенное к элементу объема $\Delta p \Delta x$ фазового пространства, есть

$$\frac{\Delta p \Delta x}{2\pi\hbar}. \quad (27,6)$$

Если ввести вместо импульса волновой вектор $k=p/\hbar$, то это число напишется как $\Delta k \Delta x/2\pi$. Оно совпадает, как и следовало ожидать, с известным выражением для числа собственных колебаний волнового поля (см. I § 76).

Важное понятие о «клетках» в фазовом пространстве относится не только к одномерному движению, которое мы рассматривали здесь, но и ко всякому квазиклассическому движению вообще. Это ясно из отмеченной его связи с числом собственных колебаний волнового поля в заданном объеме пространства. В общем случае системы с s степенями свободы на элемент объема фазового пространства приходится

$$\frac{\Delta q_1 \dots \Delta q_s \Delta p_1 \dots \Delta p_s}{(2\pi\hbar)^s} \quad (27,7)$$

квантовых состояний. В частности, всегда квазиклассично свободное движение в достаточно большом объеме пространства Ω ¹⁾. Число квантовых состояний такого движения

¹⁾ Везде, где понадобится вводить «нормировочный объем», мы будем обозначать его буквой Ω . Это — фиктивная величина, всегда выпадающая из окончательных физических результатов и вводимая только для удобства рассуждений.

с компонентами импульса в заданных интервалах Δp_x , Δp_y , Δp_z равно

$$\frac{\Omega \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (27,8)$$

Представлением о частице, движущейся в большой, но ограниченной области пространства Ω , иногда пользуются для того, чтобы заменить рассмотрение непрерывного спектра состояний рассмотрением дискретного спектра, чем достигается упрощение записи формул (мы воспользуемся таким способом во второй части этой книги). Для движения в ограниченном объеме собственные значения компонент импульса пробегает дискретный ряд (причем интервалы между соседними значениями обратно пропорциональны линейным размерам области и стремятся к нулю при их увеличении). Плотность распределения этих значений в ряду (плотность числа состояний) определяется выражением (27,8). Нормированные волновые функции (плоские волны) стационарных состояний такого дискретного спектра имеют вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (27,9)$$

(как говорят, нормировка «на 1 частицу в объеме Ω »).

§ 28. Коэффициент прохождения

Рассмотрим одномерное движение частицы в поле изображенного на рис. 4 типа: $U(x)$ монотонно возрастает от одного постоянного предела ($U=0$ при $x \rightarrow -\infty$) до другого ($U=U_0$ при $x \rightarrow +\infty$). Согласно классической механике, частица с энергией $E < U_0$, движущаяся в таком поле слева направо, дойдя до *потенциальной стенки*, отражается от нее, начиная двигаться в обратном направлении; если же $E > U_0$, то частица продолжает двигаться в прежнем направлении с уменьшенной скоростью. В квантовой механике возникает новое явление — даже при $E > U_0$ частица может отразиться от

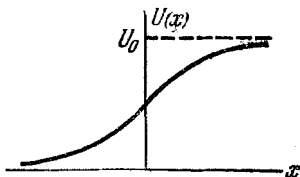


Рис. 4.

потенциальной стенки. Вероятность отражения должна вычисляться, в принципе, следующим образом.

Пусть частица движется слева направо. При больших положительных значениях x волновая функция должна описывать частицу, прошедшую «над стенкой» и движущуюся в положительном направлении оси x , т. е. должна иметь следующий асимптотический вид:

при $x \rightarrow \infty$

$$\psi \approx Ae^{ik_2x}, \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)} \quad (28,1)$$

(A — постоянная). Найдя решение уравнения Шредингера, удовлетворяющее этому предельному условию, вычисляем асимптотическое выражение при $x \rightarrow -\infty$; оно является линейной комбинацией двух решений уравнения свободного движения, т. е. имеет вид

при $x \rightarrow -\infty$

$$\psi \approx e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}. \quad (28,2)$$

Первый член соответствует падающей на «стенку» частице (предполагаем ψ нормированной таким образом, чтобы коэффициент при этом члене был равен единице); второй же член изображает отраженную от «стенки» частицу. Плотность потока в падающей волне пропорциональна k_1 , в отраженной $k_1|B|^2$, а в прошедшей $k_2|A|^2$. Определим коэффициент прохождения D как отношение плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей:

$$D = \frac{k_2}{k_1} |A|^2. \quad (28,3)$$

Аналогично можно определить коэффициент отражения R как отношение плотности отраженного потока к падающему; очевидно, что $R = 1 - D$:

$$R = |B|^2 = 1 - \frac{k_2}{k_1} |A|^2 \quad (28,4)$$

(это соотношение между A и B выполняется автоматически).

Если частица движется слева направо с энергией $E < U_0$, то k_2 — мнимая величина, и волновая функция экспоненциально затухает внутри потенциальной стенки. Отраженный поток равен падающему, т. е. частицы полностью отражаются от стенки.

Аналогичным образом рассматривается явление прохождения через *потенциальный барьер* — участок пространства, в котором потенциальная энергия превышает полную энергию частицы (на рис. 5 изображен одномерный барьер).

В § 22 было уже упомянуто, что в квантовой механике падающая на барьер частица может с отличной от нуля вероятностью пройти «сквозь него». Проницаемость барьера для падающих на него частиц можно характеризовать коэффициентом прохождения, снос

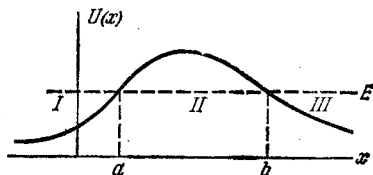


Рис. 5.

нова определяемым как отношение плотности прошедшего через барьер потока к плотности падающего.

Этот коэффициент можно оценить в общем виде для одномерного барьера, удовлетворяющего условию квазиклассичности. Напомним, что согласно этому условию (см. (26,12)) «классический импульс» частицы $p(x)$, а с ним и сама потенциальная энергия $U(x)$ должны меняться с x достаточно медленно. Это значит, что квазиклассический потенциальный барьер должен быть пологим, а тем самым и широким, и потому коэффициент прохождения в квазиклассическом случае мал.

Пусть частицы падают на барьер слева, из области I (рис. 5). В «классически недоступной» области II волновая функция убывает слева направо по экспоненциальному закону

$$\psi \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx\right), \quad |p| = \sqrt{2m(U-E)}$$

(ср. (26,11)); сравнительно медленно меняющиеся, не экспоненциальные множители здесь и ниже опускаем. На другой границе барьера (в точке $x=b$) волновая функция будет, следовательно, ослаблена в отношении

$$\exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right)$$

по сравнению с ее значением в падающей волне (в точке $x=a$). Плотность потока пропорциональна квадрату модуля волновой функции (снова с точностью до медленно меняющихся множителей). Поэтому отношение прошедшего через барьер потока к плотности падающего потока

$$D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right). \quad (28,5)$$

Эта оценка для коэффициента прохождения через барьер остается справедливой и в тех (более реальных) случаях, когда барьер квазиклассичен не на всем, а лишь на большей части своего протяжения. Таковы случаи, когда кривая потенциальной энергии полого лишь с одной стороны барьера, а по другую сторону идет настолько круто, что квазиклассическое приближение неприменимо. Общее условие применимости формулы (28,5) состоит в том, что стоящая в экспоненте величина должна быть велика.

Задачи

1. Определить коэффициент отражения частицы от прямоугольной потенциальной стенки (рис. 6); энергия частицы $E > U_0$.

Решение. Во всей области $x > 0$ волновая функция имеет вид (28,1), а в области $x < 0$ — (28,2). Постоянные A и B определяются из условия непрерывности ψ и $d\psi/dx$ при $x=0$:

$$1+B=A, \quad k_1(1-B)=k_2A,$$

откуда

$$A = \frac{2k_1}{k_1+k_2}, \quad B = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}.$$

Коэффициент отражения (28,4)¹⁾

$$R = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2 = \left(\frac{p_1-p_2}{p_1+p_2}\right)^2.$$

¹⁾ В классическом предельном случае коэффициент отражения должен обратиться в нуль. Между тем полученное выражение вовсе не содержит квантовой постоянной. Это кажущееся противоречие разъясняется следующим образом. Классическому пределу соответствует случай, когда де-бройлевская длина волны частицы $\lambda \sim \hbar/p$ мала по сравнению с характеристическими размерами задачи, т. е. по сравнению с расстояниями, на которых заметно меняется поле $U(x)$. В рассматриваемом же схематическом примере это расстояние равно нулю (в точке $x=0$), так что предельный переход не может быть произведен.

При $E = U_0$ ($k_2 = 0$) R обращается в единицу, а при $E \rightarrow \infty$ стремится к нулю, как $(U_0/4E)^2$.

2. Определить коэффициент прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер (рис. 7).

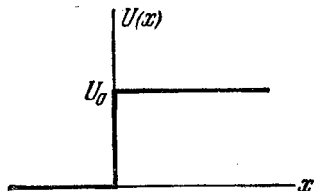


Рис. 6.

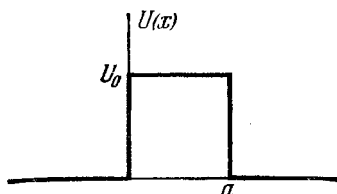


Рис. 7.

Решение. Пусть $E > U_0$ и падающая частица движется слева направо. Тогда имеем для волновой функции в различных областях выражения вида:

$$\begin{aligned} \text{при } x < 0 & \quad \psi = e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x}, \\ \text{при } 0 < x < a & \quad \psi = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x}, \\ \text{при } x > a & \quad \psi = Ce^{ik_1x} \end{aligned}$$

(со стороны $x > a$ должна быть только прошедшая волна, распространяющаяся в положительном направлении оси x). Постоянные A , B , B' , C определяются из условий непрерывности ψ и $d\psi/dx$ в точках $x=0$, a . Коэффициент прохождения определяется как

$$D = k_1 |C|^2 / k_1 = |C|^2.$$

При вычислении получается следующий результат:

$$D = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 ak_2 + 4k_1^2 k_2^2}.$$

При $E < U_0$ k_2 — мнимая величина; соответствующее выражение для D получается заменой k_2 на $i\kappa_2$, где $\hbar\kappa_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}$:

$$D = \frac{4k_1^2 \kappa_2^2}{(k_1^2 + \kappa_2^2)^2 \operatorname{sh}^2 a\kappa_2 + 4k_1^2 \kappa_2^2}.$$

3. Оценить по формуле (28,5) коэффициент прохождения через потенциальный барьер, изображенный на рис. 8: $U(x) = 0$ при $x < 0$, $U(x) = U_0 - Fx$ при $x > 0$.

Решение. Простое вычисление приводит к результату

$$D \sim \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar F} (U_0 - E)^{3/2} \right].$$

4. Оценить вероятность выхода частицы (с равным нулю моментом) из центрально-симметричной потенциальной ямы: $U(r) = -U_0$ при $r < r_0$, а при $r > r_0$ — кулоново отталкивание: $U(r) = \alpha/r$ (рис. 9).

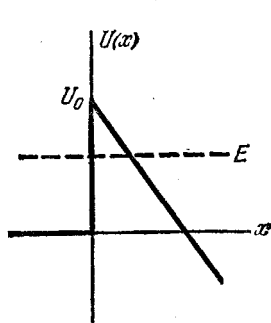


Рис. 8.

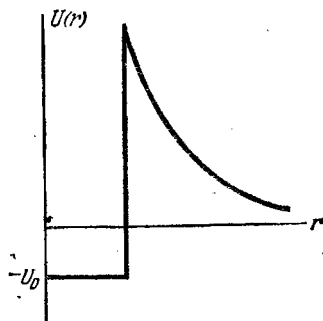


Рис. 9.

Решение. Согласно (28,5) имеем ¹⁾

$$w \sim \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{\alpha/E} \sqrt{2m \left(\frac{\alpha}{r} - E \right)} dr \right]$$

и вычисление интеграла дает

$$w \sim \exp \left\{ -\frac{2\alpha}{\hbar} \left[\sqrt{\frac{2m}{E}} \arccos \sqrt{\frac{Er_0}{\alpha}} - \sqrt{\frac{Er_0}{\alpha} \left(1 - \frac{Er_0}{\alpha} \right)} \right] \right\}.$$

В предельном случае $r_0 \rightarrow 0$ эта формула переходит в

$$w \sim \exp \left(-\frac{\pi\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \right) = \exp \left(-\frac{2\pi\alpha}{\hbar v} \right).$$

Эти формулы применимы, когда показатель велик, т. е. $\alpha/\hbar v \gg 1$.

§ 29. Движение в центрально-симметричном поле

Задача о движении двух взаимодействующих друг с другом частиц в квантовой механике может быть сведена к задаче об одной частице, — аналогично тому, как это может быть сделано в классической механике (I § 11).

¹⁾ Здесь используется то обстоятельство, что задача о движении частицы (с равным нулю моментом) в центральном поле сводится к задаче об одномерном движении с той же потенциальной энергией — см. § 30.

Гамильтониан двух частиц (с массами m_1, m_2), взаимодействующих по закону $U(r)$ (r — расстояние между частицами), имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + U(r), \quad (29,1)$$

где Δ_1, Δ_2 — операторы Лапласа по координатам частиц. Введем вместо $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ новые переменные $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (29,2)$$

($\mathbf{r}$ — вектор взаимного расстояния, а $\mathbf{R}$ — радиус-вектор центра инерции частиц). Простое вычисление приводит к результату

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \quad (29,3)$$

(Δ_R и Δ — операторы Лапласа соответственно по компонентам векторов $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$; $m_1 + m_2$ — полная масса системы, $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ — приведенная масса).

Таким образом, гамильтониан распадается на сумму двух независимых частей. Соответственно этому можно искать $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в виде произведения $\Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$, где функция $\Phi(\mathbf{R})$ описывает движение центра инерции (как свободное движение частицы с массой $m_1 + m_2$), а $\psi(\mathbf{r})$ описывает относительное движение частиц (как движение частицы массы m в центральном поле $U(r)$).

Уравнение Шредингера для движения частицы в центральном поле имеет вид

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0. \quad (29,4)$$

Воспользовавшись известным выражением для оператора Лапласа в сферических координатах, пишем

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0. \quad (29,5)$$

Если ввести сюда оператор (14,15) квадрата момента $\hat{l}^2$, то мы получим

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2}{r^2} \psi \right] + U(r) \psi = E \psi. \quad (29,6)$$

При движении в центральном поле момент импульса сохраняется. Будем рассматривать стационарные состояния с определенными значениями момента l и его проекции m . Заданием значений l и m определяется угловая зависимость волновых функций. Соответственно этому ищем решения уравнения (29,6) в виде

$$\psi = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (29,7)$$

Вспомнив, что собственная функция момента удовлетворяет уравнению $\hat{l}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}$, получим для «радиальной функции» $R(r)$ следующее уравнение:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R = 0. \quad (29,8)$$

Заметим, что это уравнение не содержит вовсе значения $l_z = m$, что соответствует известному уже нам $(2l+1)$ -кратному вырождению уровней по направлениям момента.

Займемся исследованием радиальной части волновых функций. Подстановкой

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \quad (29,9)$$

уравнение (29,8) приводится к виду

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0. \quad (29,10)$$

Будем считать, что потенциальная энергия $U(r)$ если и обращается в бесконечность при $r \rightarrow 0$, то медленнее, чем $1/r^2$, т. е.

$$r^2 U(r) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow 0. \quad (29,11)$$

Этим исключается возможность «падения» частицы в центр (в поле, в котором $U \rightarrow -\infty$ при $r \rightarrow 0$), о чем уже упоминалось в примечании на стр. 78. Тогда волновая функция (а с нею и плотность вероятности $|\psi|^2$) остается конечной во всем пространстве, включая точку $r=0$. Функция же $\chi = rR$ должна, следовательно, обращаться при $r=0$ в нуль:

$$\chi(0) = 0. \quad (29,12)$$

Уравнение (29,10) по форме совпадает с уравнением Шредингера для одномерного движения в поле с потенциальной

энергией

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}; \quad (29,13)$$

второй член здесь можно назвать центробежной энергией. Таким образом, задача о движении в центральном поле сводится к задаче об одномерном движении в области, ограниченной с одной стороны (граничное условие $\chi=0$ при $r=0$). «Одномерный характер» имеет также и условие нормировки для функций χ , определяющееся интегралом

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi|^2 dr = 1. \quad (29,14)$$

Заданием (допустимого) значения E решение уравнения (29,10) с граничным условием (29,12) определяется полностью. Это значит, что при движении в центральном поле состояние полностью определяется значениями E , l , m : энергия, величина и проекция момента составляют вместе полный набор физических величин для такого движения.

Сведение задачи о движении в центральном поле к одномерной позволяет применить осцилляционную теорему (§ 22). Расположим собственные значения энергии (дискретного спектра) при заданном l в порядке возрастания, переименовав их порядковыми номерами n_r , причем наиболее низкому уровню приписывается номер $n_r=0$. Тогда n_r определяет число узлов радиальной части волновой функции при конечных значениях r (не считая точки $r=0$). Число n_r называют *радиальным квантовым числом*. Число l при движении в центральном поле иногда называют *азимутальным квантовым числом*, а m — *магнитным квантовым числом*.

Для обозначения состояний с различными значениями момента l частицы существует общепринятая символика; состояния обозначаются буквами латинского алфавита со следующим соответствием:

$$\begin{array}{cccccccc} l=0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \dots \\ s & p & d & f & g & h & i & k \dots \end{array} \quad (29,15)$$

Определим вид радиальной функции вблизи начала координат. При малых r ищем $R(r)$ в виде $R = \text{const} \cdot r^s$. Подставив это в уравнение

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - l(l+1) R = 0,$$

получающееся из (29,8) умножением последнего на r^2 и переходом к $r \rightarrow 0$ (с учетом (29,11)), найдем

$$s(s+1) = l(l+1).$$

Отсюда $s=l$ или $s=-l-1$. Решение с $s=-l-1$ не удовлетворяет необходимым условиям: оно обращается в бесконечность при $r=0$. Таким образом, остается решение с $s=l$, т. е. вблизи центра волновые функции состояний с заданными l пропорциональны r^l :

$$R \approx \text{const} \cdot r^l. \quad (29,16)$$

Вероятность частице находиться на расстоянии от центра между r и $r+dr$ определяется квадратом $|rR|^2$ и поэтому пропорциональна $r^{2(l+1)}$. Мы видим, что она тем быстрее обращается в нуль при $r \rightarrow 0$, чем больше значение l .

§ 30. Сферические волны

Плоская волна (20,9) описывает стационарное состояние свободной частицы, в котором она имеет определенный импульс p (и энергию $E=p^2/2m$). Рассмотрим теперь такие стационарные состояния (*сферические волны*), в которых частица обладает, наряду с энергией, определенными значениями величины и проекции момента. Вместо энергии удобно при этом ввести величину волнового вектора

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}. \quad (30,1)$$

Волновая функция состояния с моментом l и его проекцией m имеет вид

$$\psi_{klm} = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (30,2)$$

где радиальная функция определяется уравнением

$$R''_{kl} + \frac{2}{r} R'_{kl} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{kl} = 0 \quad (30,3)$$

(уравнение (29,8) без $U(r)$). Волновые функции ψ_{klm} , относящиеся к непрерывному (по k) спектру, удовлетворяют условиям нормировки и взаимной ортогональности:

$$\int \psi_{k'l'm'}^* \psi_{klm} dV = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(k' - k).$$

Взаимная ортогональность при различных l , l' и m , m' обеспечивается угловыми функциями. Радиальные же функции должны быть нормированы условием

$$\int_0^{\infty} r^2 R_{k'l} R_{kl} dr = \delta(k' - k). \quad (30,4)$$

При $l=0$ уравнение (30,3) можно написать как

$$\frac{d^2}{dr^2} (r R_{k0}) + k^2 r R_{k0} = 0; \quad (30,5)$$

его решение, конечное при $r=0$ и нормированное условием (30,4), есть

$$R_{k0} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin kr}{r}. \quad (30,6)$$

Для проверки правильности нормировки пишем:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} r^2 R_{k'0} R_{k0} dr &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \sin k'r \sin kr \cdot dr = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos(k' - k)r \cdot dr + \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos(k' + k)r \cdot dr. \end{aligned} \quad (30,7)$$

Согласно формуле

$$\int_0^{\infty} \cos \alpha x \cdot dx = \pi \delta(\alpha) \quad (30,8)$$

первый интеграл в (30,7) дает требуемую δ -функцию; второй же интеграл обращается в нуль, так как $k+k' \neq 0$ ¹⁾.

При $l \neq 0$ функции R_{kl} имеют более сложный вид. Но на больших расстояниях r они могут отличаться от (30,6) лишь фазой тригонометрического множителя; это следует из того, что при $r \rightarrow \infty$ в уравнении (30,3) можно опустить член $l(l+1)/r^2$, и тогда оно не отличается от уравнения с $l=0$ (поскольку, однако, такое уравнение будет относиться лишь к области больших r , отпадает возможность выбора одного из двух независимых решений по условию конечности при $r=0$). Фактически изменение фазы по сравнению

¹⁾ Формула (30,8) получается из (12,9) отделением вещественной части в обеих сторонах равенства и заменой интеграла в пределах от $-\infty$ до ∞ на удвоенный интеграл от 0 до ∞ .

со случаем $l=0$ оказывается равным $\pi l/2$, так что асимптотический вид сферической волны на больших расстояниях ¹⁾

$$R_{kl} \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr - \pi l/2)}{r}. \quad (30,9)$$

Аналогичное асимптотическое выражение для радиальной части волновой функции справедливо не только при свободном движении частицы, но и для движения (с положительной энергией) в любом поле, достаточно быстро убывающем при $r \rightarrow \infty$ ²⁾. На больших расстояниях можно пренебречь в уравнении Шредингера как полем, так и центробежной энергией, и мы снова получим для R_{kl} уравнение вида (30,5). Общее решение этого уравнения

$$R_{kl} \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right), \quad (30,10)$$

где δ_l — постоянный *фазовый сдвиг*; член $\pi l/2$ в аргументе синуса прибавлен для того, чтобы в отсутствие поля было $\delta_l=0$. Постоянная фаза δ_l определяется граничным условием (конечность R_{kl} при $r=0$), при котором должно решаться точное уравнение Шредингера, и не может быть вычислена в общем виде. Фазы δ_l являются, конечно, функциями как от l , так и от k и представляют собой существенную характеристику собственных функций непрерывного спектра.

Рассмотрим свободную частицу, движущуюся с определенным импульсом $p = \hbar k$ в положительном направлении оси z . Волновая функция такой частицы есть плоская волна:

$$\psi = \text{const} \cdot e^{ikz} = \text{const} \cdot e^{ikr \cos \theta}. \quad (30,11)$$

Разложим ее по волновым функциям ψ_{klm} свободного движения с определенными орбитальными моментами. Поскольку функция (30,11) обладает аксиальной симметрией вокруг оси z , то в ее разложение могут войти только функ-

¹⁾ Решение уравнения (30,3), конечное при $r=0$, выражается через функцию Бесселя полуцелого порядка:

$$R_{kl} = J_{l+1/2}(kr) / \sqrt{kr}.$$

Известное асимптотическое выражение функций Бесселя приводит к (30,9).

²⁾ Именно, поле $U(r)$ должно убывать быстрее, чем $1/r$.

ции, не зависящие от угла φ , т. е. функции с $m=0$. Эти функции $\psi_{kl0} = \text{const} \cdot P_l(\cos \theta) R_{kl}$ и, таким образом, искомое разложение должно иметь вид

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta), \quad (30,12)$$

где a_l — постоянные коэффициенты.

Для определения этих коэффициентов умножим равенство (30,12) на $P_l(\cos \theta) \sin \theta$ и проинтегрируем его по $d\theta$. Имея в виду взаимную ортогональность полиномов P_l с различными l и значение нормировочного интеграла

$$\int_0^{\pi} P_l^2(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1}, \quad (30,13)$$

получим

$$\int_0^{\pi} e^{ikr \cos \theta} P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta = a_l \frac{2}{2l+1} R_{kl}(r). \quad (30,14)$$

Интеграл в левой стороне равенства легко вычисляется в области больших r , где можно пренебречь всеми членами высших порядков по $1/r$. Интегрируя по частям по переменной $\mu = \cos \theta$, получим, с этой точностью,

$$\int_{-1}^1 e^{ikr\mu} P_l(\mu) d\mu \approx P_l(\mu) \frac{e^{ikr\mu}}{ikr} \Big|_{-1}^1 = \frac{e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}}{ikr}$$

(здесь использованы также известные значения $P_l(1)=1$, $P_l(-1)=(-1)^l$). Это выражение можно записать в виде

$$\frac{2i^l}{kr} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right),$$

после чего равенство (30,14) с R_{kl} из (30,9) дает

$$a_l = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{i^l}{k} (2l+1). \quad (30,15)$$

С этими коэффициентами разложение (30,12) принимает на больших расстояниях r следующую асимптотическую

форму:

$$e^{ikz} \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right). \quad (30,16)$$

Это разложение понадобится нам в дальнейшем, в теории рассеяния частиц.

Задачи

1. Определить уровни энергии для движения частицы с моментом $l=0$ в центрально-симметричной потенциальной яме: $U(r) = -U_0$ при $r < a$, $U(r) = 0$ при $r > a$.

Решение. При $l=0$ волновые функции зависят только от r . Внутри ямы уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) + k^2 \psi = 0, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - |E|)}.$$

Решение, конечное при $r=0$:

$$\psi = A \frac{\sin kr}{r}.$$

При $r > a$ имеем уравнение

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) - \kappa^2 \psi = 0, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|}.$$

Решение, обращающееся в нуль на бесконечности:

$$\psi = A' \frac{e^{-\kappa r}}{r}.$$

Условие непрерывности логарифмической производной от $r\psi$ при $r=a$ дает

$$k \operatorname{ctg} ka = -\kappa = - \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - k^2}, \quad (1)$$

или

$$\sin ka = \pm ka \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2 U_0}}. \quad (2)$$

Этим уравнением определяются, неявным образом, искомые уровни энергии (должны быть взяты те корни уравнения, для которых $\operatorname{ctg} ka < 0$, как это следует из (1)). Первый из этих уровней (уровней с $l=0$) является в то же время самым глубоким из всех вообще уровней энергии, т. е. соответствует нормальному состоянию частицы.

При слишком малой глубине U_0 потенциальной ямы уровни отрицательной энергии вообще отсутствуют, частица не может «удержаться» ямой. Это легко видеть из уравнения (2) с помощью следующего графического

ческого построения. Корни уравнения вида $\pm \sin x = \alpha x$ изображаются точками пересечения прямой $y = \alpha x$ кривыми $y = \pm \sin x$, причем мы должны рассматривать только те точки пересечения, в которых $\operatorname{ctg} x < 0$; соответствующие участки кривых $y = \pm \sin x$ изображены на рис. 10 сплошной линией. При слишком больших α (малых U_0) таких точек пересечения вообще нет. Первая такая точка появляется, когда прямая $y = \alpha x$ занимает указанное на рисунке положение, т. е. при $\alpha = 2/\pi$, и находится при $x = \pi/2$. Полагая $\alpha = \hbar/\sqrt{2ma^2U_0}$, $x = ka$, получаем отсюда для минимальной глубины ямы, при которой появляется первый отрицательный уровень,

$$U_0 \min = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \quad (3)$$

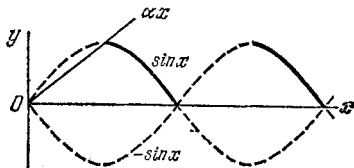


Рис. 10.

Эта величина тем больше, чем меньше радиус ямы a . Величина первого уровня в момент его появления определяется из $ka = \pi/2$ и равна нулю, как и естественно было ожидать. По мере дальнейшего увеличения глубины ямы нормальный уровень тоже понижается.

2. Определить уровни энергии пространственного осциллятора (частица в поле $U = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$) и кратности их вырождения.

Решение. Уравнение Шредингера для частицы в поле $U = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$ допускает разделение переменных, приводящее к трем уравнениям типа линейного осциллятора. Поэтому уровни энергии

$$E = \hbar \omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) = \hbar \omega \left(n + \frac{3}{2} \right).$$

Кратность вырождения n -го уровня равна числу способов, которыми n может быть представлено в виде суммы трех целых (включая значение 0) положительных чисел ¹⁾; оно равно

$$\frac{1}{2} (n+1)(n+2).$$

§ 31. Движение в кулоновом поле

Рассмотрим движение электрона в атоме водорода или в водородоподобном ионе: электрон в поле ядра с зарядом $+Ze$. В предположении неподвижности ядра вопрос сводится к задаче о движении частицы в кулоновом поле притяжения

$$U = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (31,1)$$

¹⁾ Другими словами, это есть число способов, которыми n одинаковых шаров могут быть разложены по трем ящикам.

Из изложенных в § 22 общих соображений заранее очевидно, что спектр положительных собственных значений энергии E будет непрерывным, а спектр отрицательных энергий — дискретным. Именно последний, отвечающий связанным состояниям электрона, и будет интересовать нас здесь.

В задачах, связанных с кулоновым полем, удобно пользоваться особыми единицами для измерения всех величин — так называемыми *атомными единицами*. Именно, в качестве единиц измерения массы, длины и времени выбираются соответственно

$$m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ г}, \quad \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

$$\frac{\hbar^3}{me^4} = 2,42 \cdot 10^{-17} \text{ сек}$$

(m — масса электрона); атомную единицу длины называют *боровским радиусом*. Все остальные единицы выводятся отсюда; так, единицей энергии будет ¹⁾

$$\frac{me^4}{\hbar^2} = 4,36 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 27,21 \text{ эв.}$$

Атомной единицей заряда является элементарный заряд $e = 4,80 \cdot 10^{-10}$ CGSE. Переход в формулах к атомным единицам можно произвести, положив в них $e=1$, $m=1$, $\hbar=1$.

Уравнение (29,8) для радиальных функций имеет вид

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) R = 0, \quad (31,2)$$

или, в новых единицах,

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + 2 \left(E + \frac{Z}{r} \right) R = 0. \quad (31,3)$$

Введем вместо параметра E и переменной r новые величины

$$n = \frac{Z}{\sqrt{-2E}}, \quad \rho = \frac{2rZ}{n} \quad (31,4)$$

(при отрицательных E величина n — вещественное положительное число). После этой подстановки уравнение (31,3)

¹⁾ Половину этой величины называют *ридбергом* (Ry).

принимает вид

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (31,5)$$

(штрихи означают дифференцирование по ρ).

При малых ρ решение, удовлетворяющее необходимым условиям конечности, пропорционально ρ^l (см. (29,16)). Для выяснения асимптотического поведения R при больших ρ опускаем в (31,5) члены с $1/\rho$ и $1/\rho^2$ и получаем уравнение

$$R'' = \frac{R}{4},$$

откуда $R = e^{\pm \rho/2}$. Интересующее нас исчезающее на бесконечности решение, следовательно, при больших ρ ведет себя как $e^{-\rho/2}$.

Ввиду этого естественно сделать подстановку

$$R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho), \quad (31,6)$$

после чего уравнение (31,5) приобретает вид

$$\rho w'' + (2l+2-\rho) w' + (n-l-1) w = 0. \quad (31,7)$$

Решение этого уравнения должно расходиться на бесконечности не быстрее конечной степени ρ , а при $\rho=0$ должно быть конечным.

Поступая в точности так, как это было сделано в § 25, ищем решение в виде ряда

$$w = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \rho^s. \quad (31,8)$$

Подставив в (31,7), находим

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\infty} [a_s s(s-1) + (2l+2) a_s s] \rho^{s-1} + \\ + \sum_{s=0}^{\infty} [-a_s s + a_s (n-l-1)] \rho^s = 0 \end{aligned}$$

или, заменив в первой сумме индекс суммирования s на $s+1$,

$$\sum_{s=0}^{\infty} [a_{s+1} (s+1) (s+2l+2) + a_s (n-l-1-s)] \rho^s = 0.$$

Приравняв нулю коэффициенты разложения, находим рекуррентное соотношение

$$a_{s+1} = -a_s \frac{n-l-1-s}{(s+1)(s+2l+2)}. \quad (31,9)$$

Отсюда заключаем, что ряд (31,8) сведется к полиному (степени $n-l-1$), если $n=l+1, l+2, \dots$

Таким образом, число n должно быть целым положительным, причем при заданном l

$$n \geq l+1. \quad (31,10)$$

Вспоминая определение (31,4) параметра n , находим

$$E = -\frac{Z^2}{2n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (31,11)$$

Этим решается задача об определении уровней энергии дискретного спектра в кулоновом поле. Мы видим, что имеется бесконечное множество уровней между нормальным уровнем $E_1 = -1/2$ и нулем. Интервалы между каждыми двумя последовательными уровнями уменьшаются с увеличением n ; уровни сгущаются по мере приближения к значению $E=0$, при котором дискретный спектр смыкается с непрерывным. В обычных единицах формула (31,11) имеет следующий вид ¹⁾:

$$E = -\frac{Z^2 m e^4}{2 \hbar^2 n^2}. \quad (31,12)$$

Целое число n называется *главным квантовым числом*. Радиальное же квантовое число, определенное в § 29, равно

$$n_r = n - l - 1.$$

При заданном значении главного квантового числа число l может принимать значения

$$l = 0, 1, \dots, n-1, \quad (31,13)$$

всего n различных значений. В выражение (31,11) для энергии входит только число n . Поэтому все состояния с различными l , но одинаковыми n обладают одинаковой энергией.

¹⁾ Формула (31,12) была получена впервые Бором в 1913 г. до создания квантовой механики. В квантовой механике она была выведена Паули (1926) матричным методом, а через несколько месяцев — Шредингером с помощью волнового уравнения.

Таким образом, каждое собственное значение оказывается вырожденным не только по магнитному квантовому числу m (как при всяком движении в центрально-симметричном поле), но и по числу l . Это последнее вырождение (о нем говорят как о *случайном* или *кулоновом*) специфично именно для кулонового поля. Каждому данному значению l соответствует, как мы знаем, $2l+1$ различных значений m . Поэтому кратность вырождения n -го уровня энергии равна

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (31,14)$$

Мы не будем выписывать общего выражения для волновых функций электрона, а ограничимся лишь волновой функцией его основного состояния. При $n=1$, $l=0$ ряд (31,8) сводится к постоянной; то же самое относится и к угловой функции Y_{00} . Поэтому волновая функция

$$\psi = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-Zr}. \quad (31,15)$$

Она нормирована обычным условием

$$\int |\psi|^2 dV = 4\pi \int_0^\infty r^2 |\psi|^2 dr = 1.$$

«Размеры» атома характеризуются тем расстоянием r , на котором происходит существенное падение электронной плотности $|\psi|^2$. Для атома водорода ($Z=1$) порядок величины этих расстояний дается как раз атомной единицей длины, как это видно из (31,15). В обычных единицах это есть боровский радиус $a_B = \hbar^2/me^2$. Порядок величины скорости электрона в атоме определяется соотношением неопределенности: $mv \sim \hbar/a_B$, откуда $v \sim e^2/\hbar$.

Задачи

1. Определить распределение вероятностей различных значений импульса в основном состоянии атома водорода ($Z=1$).

Решение. Волновая функция в $\mathbf{p}$ -представлении получается из (31,15) как интеграл (12,12). Интеграл вычисляется путем перехода к сферическим координатам с полярной осью вдоль $\mathbf{p}$:

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} dV = \frac{1}{\pi \sqrt{2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-r} e^{-ipr \cos \theta} d \cos \theta \cdot r^2 dr.$$

В результате получим

$$\alpha(\mathbf{p}) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \frac{1}{(1+p^2)^2},$$

а плотность вероятности в $\mathbf{p}$ -пространстве есть $|\alpha(\mathbf{p})|^2$.

2. Определить средний потенциал поля, создаваемого ядром и электроном в основном состоянии атома водорода.

Решение. Средний потенциал Φ_e , создаваемый «электронным облаком» в произвольной точке $\mathbf{r}$, проще всего определяется как сферически-симметричное решение уравнения Пуассона с плотностью заряда $\rho = -|\psi|^2$:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\Phi_e) = -4\pi\rho = 4e^{-2r}.$$

Интегрируя это уравнение, выбирая постоянные так, чтобы $\Phi_e(0)$ было конечным, а $\Phi_e(\infty) = 0$, и прибавляя потенциал поля ядра, получим

$$\Phi = \frac{1}{r} + \Phi_e(r) = \left(\frac{1}{r} + 1 \right) e^{-2r}.$$

При $r \ll 1$ имеем $\Phi \approx 1/r$ (поле ядра), а при $r \gg 1$ потенциал $\Phi \approx e^{-2r}$ (экранирование ядра электроном).

Глава IV

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

§ 32. Возмущения, не зависящие от времени

Точное решение уравнения Шредингера может быть найдено лишь в сравнительно небольшом числе простейших случаев. Большинство задач квантовой механики приводит к слишком сложным уравнениям, которые не могут быть решены точным образом. Часто, однако, в условиях задачи фигурируют величины разного порядка; среди них могут оказаться малые величины, после пренебрежения которыми задача упрощается настолько, что делается возможным ее точное решение. В таком случае первый шаг в решении поставленной физической задачи состоит в точном решении упрощенной задачи, а второй — в приближенном вычислении поправок, обусловленных малыми членами, отброшенными в упрощенной задаче. Общий метод для вычисления этих поправок называется *теорией возмущений*.

Предположим, что гамильтониан данной физической системы имеет вид

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

где $\hat{V}$ представляет собой малую поправку (*возмущение*) к «невозмущенному» оператору $\hat{H}_0$. В этом и следующем параграфах мы будем рассматривать возмущения, не зависящие явно от времени (то же самое предполагается и в отношении $\hat{H}_0$). Условия, необходимые для того, чтобы можно было рассматривать оператор $\hat{V}$ как «малый» по сравнению с оператором $\hat{H}_0$, будут выяснены ниже.

Задача теории возмущений для дискретного спектра может быть сформулирована следующим образом. Предполагается, что собственные функции $\psi_n^{(0)}$ и собственные

значения $E_n^{(0)}$ дискретного спектра невозмущенного оператора $\hat{H}_0$ известны, т. е. известны точные решения уравнения

$$\hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)}. \quad (32,1)$$

Требуется найти приближенные решения уравнения

$$\hat{H} \psi = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi, \quad (32,2)$$

т. е. приближенные выражения для собственных функций ψ_n и значений E_n возмущенного оператора $\hat{H}$.

В этом параграфе мы будем предполагать, что все собственные значения оператора $\hat{H}_0$ не вырождены. Кроме того, для упрощения выводов будем считать, что имеется только дискретный спектр уровней энергии.

Вычисления удобно производить с самого начала в матричном виде. Для этого разложим искомую функцию ψ по функциям $\psi_n^{(0)}$:

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)}. \quad (32,3)$$

Подставляя это разложение в (32,2), получим

$$\sum_m c_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m c_m E \psi_m^{(0)},$$

а умножив это равенство с обеих сторон на $\psi_k^{(0)}$ и интегрируя, найдем

$$(E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m. \quad (32,4)$$

Здесь введена матрица V_{km} оператора возмущения, определенная с помощью невозмущенных функций $\psi_m^{(0)}$:

$$V_{km} = \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} dq. \quad (32,5)$$

Будем искать значения коэффициентов c_m и энергии E в виде рядов

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots, \quad c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots,$$

где величины $E^{(1)}$, $c_m^{(1)}$ — того же порядка малости, что и

возмущение $\hat{V}$, величины $E^{(2)}$, $c_m^{(2)}$ — второго порядка малости и т. д.

Определим поправки к n -му собственному значению и собственной функции, соответственно чему полагаем $c_n^{(0)}=1$, $c_m^{(0)}=0$ ($m \neq n$). Для отыскания первого приближения подставим в уравнение (32,4) $E=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}$, $c_k=c_k^{(0)}+c_k^{(1)}$, сохранив только члены первого порядка. Уравнение с $k=n$ дает

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dq. \quad (32,6)$$

Таким образом, поправка первого приближения к собственному значению $E_n^{(0)}$ равна среднему значению возмущения в состоянии $\psi_n^{(0)}$.

Уравнение (32,4) с $k \neq n$ дает

$$c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (k \neq n), \quad (32,7)$$

а $c_n^{(1)}$ остается произвольным и должно быть выбрано так, чтобы функция $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}$ была нормирована с точностью до членов первого порядка включительно. Для этого надо положить $c_n^{(1)}=0$. Действительно, функция

$$\psi_n^{(1)} = \sum'_m \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} \quad (32,8)$$

(штрих у знака суммы означает, что при суммировании по m надо опустить член с $m=n$) ортогональна к $\psi_n^{(0)}$, а поэтому интеграл от $|\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}|^2$ отличается от единицы лишь на величину второго порядка малости.

Формула (32,8) определяет поправку первого приближения к волновым функциям. Из нее, кстати, видно, каково условие применимости рассматриваемого метода. Именно, должно иметь место неравенство

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|, \quad (32,9)$$

т. е. матричные элементы возмущения должны быть малы по сравнению с соответствующими разностями невозмущенных уровней энергии.

Определим еще поправку второго приближения к собственному значению $E_n^{(0)}$. Для этого подставим в (32,4) $E=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}$, $c_k=c_k^{(0)}+c_k^{(1)}+c_k^{(2)}$ и рассмотрим члены

второго порядка малости. Уравнение с $k=n$ дает

$$E_n^{(2)} c_n^{(0)} = \sum'_m V_{nm} c_m^{(1)},$$

откуда

$$E_n^{(2)} = \sum'_m \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (32,10)$$

(мы подставили $c_m^{(1)}$ из (32,7) и воспользовались тем, что в силу эрмитовости оператора $\hat{V}$ $V_{mn} = V_{nm}^*$).

Отметим, что поправка второго приближения к энергии нормального состояния всегда отрицательна. Действительно, если $E_n^{(0)}$ соответствует наименьшему значению, то все члены в сумме (32,10) отрицательны.

Полученные результаты непосредственно обобщаются на случай наличия у оператора $\hat{H}_0$ также и непрерывного спектра (причем речь идет по-прежнему о возмущенном состоянии дискретного спектра). Для этого надо только к суммам по дискретному спектру прибавить соответствующие интегралы по непрерывному спектру.

Для состояний же непрерывного спектра вопрос об изменении уровней энергии, очевидно, вообще не возникает, и речь может идти лишь о вычислении поправок к собственным функциям.

Упомянем в этой связи случай, когда роль возмущения играет потенциальная энергия частицы, находящейся в слабом внешнем поле — в достаточно неглубокой потенциальной яме. Невозмущенное уравнение Шредингера есть тогда просто уравнение свободного движения частицы, а уровни энергии положительны и образуют непрерывный спектр.

В конце § 24 было упомянуто, что в такой яме не существует связанных состояний, т. е. нет отрицательных уровней энергии. Действительно, при энергии $E=0$ невозмущенная волновая функция свободного движения сводится к постоянной: $\psi^{(0)} = \text{const}$. Поскольку поправка $\psi^{(1)} \ll \psi^{(0)}$, то ясно, что возмущенная волновая функция движения в яме $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$ нигде не обращается в нуль. Собственная же функция, не имеющая узлов, относится к нормальному состоянию (§ 22). Другими словами, $E=0$ остается наименьшим возможным значением энергии частицы.

Условие применимости теории возмущений к этому случаю состоит в требовании, чтобы глубина ямы $|U|$ была мала по сравнению со средней кинетической энергией, которой обладала бы частица, заключенная в объеме ямы. Согласно соотношению неопределенности, импульс такой частицы был бы $p \sim \hbar/a$ (где a — линейные размеры ямы); отсюда получается указанное в § 24 условие $|U| \ll \hbar^2/ma^2$ ¹⁾.

Задача

Определить уровни энергии ангармонического линейного осциллятора с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4.$$

Решение. Матричные элементы от x^3 и x^4 можно получить непосредственно согласно правилу умножения матриц, используя выражение (25,4) для матричных элементов от x . Для отличных от нуля матричных элементов от x^3 найдем

$$(x^3)_{n-3, n} = (x^3)_{n, n-3} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \sqrt{n(n-1)(n-2)},$$

$$(x^3)_{n-1, n} = (x^3)_{n, n-1} = 3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} n^{3/2}.$$

Диагональные элементы в этой матрице отсутствуют, так что поправка первого приближения от члена αx^3 в гамильтониане (рассматриваемого как возмущение к гармоническому осциллятору) отсутствует. Поправка же второго приближения от этого члена — того же порядка, что и поправка первого приближения от члена βx^4 . Диагональные матричные элементы от x^4

$$(x^4)_{n, n} = \frac{3}{4} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 (2n^2 + 2n + 1).$$

С помощью формул (32,6) и (32,10) находим в результате следующее приближенное выражение для уровней энергии ангармонического осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{15}{4} \frac{\alpha^2}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 \left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) + \frac{3\beta}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right).$$

¹⁾ Одно- или двумерной яме (в которой поле есть функция только одной или двух координат) отвечают бесконечные в двух или в одном направлении размеры, и потому это условие не может выполняться. С этим обстоятельством связана неприменимость теории возмущений к движению (с малой энергией) в таких ямах, а потому и неприменимость заключения об отсутствии связанных состояний.

§ 33. Секулярное уравнение

Обратимся теперь к случаю, когда невозмущенный оператор $\hat{H}_0$ имеет вырожденные собственные значения. Будем обозначать посредством $\psi_n^{(0)}$, $\psi_n^{(0)}$ собственные функции, относящиеся к одному и тому же собственному значению энергии $E_n^{(0)}$. Выбор этих функций, как мы знаем, не однозначен — вместо них можно выбрать любые s (s — кратность вырождения уровня $E_n^{(0)}$) независимых линейных комбинаций этих же функций. Он перестает, однако, быть произвольным, если мы подчиним волновые функции требованию, чтобы их изменение под влиянием приложенного малого возмущения было малым.

Пока что будем подразумевать под $\psi_n^{(0)}$, $\psi_{n'}^{(0)}$, ... некоторые произвольно выбранные невозмущенные собственные функции. Правильные функции нулевого приближения — линейные комбинации вида $c_n^{(0)}\psi_n^{(0)} + c_{n'}^{(0)}\psi_{n'}^{(0)} + \dots$. Коэффициенты в этих комбинациях определяются (вместе с поправками первого приближения к собственным значениям) следующим образом.

Выпишем уравнения (32,4) с $k=n, n', \dots$, подставив в них в первом приближении $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$, причем для величин c_k достаточно ограничиться нулевыми значениями $c_n = c_n^{(0)}$, $c_{n'} = c_{n'}^{(0)}$, ...; $c_m = 0$ при $m \neq n, n', \dots$. Тогда получим

$$E^{(1)}c_n^{(0)} = \sum_{n'} V_{nn'}c_{n'}^{(0)}$$

или

$$\sum_{n'} (V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}) c_{n'}^{(0)} = 0, \quad (33,1)$$

где $n, n', \dots$ пробегают все значения, нумерующие состояния, относящиеся к данному невозмущенному собственному значению $E_n^{(0)}$. Эта система однородных линейных уравнений для величин $c_{n'}^{(0)}$ имеет отличные от нуля решения при условии обращения в нуль определителя, составленного из коэффициентов при неизвестных. Таким образом, получаем уравнение

$$|V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}| = 0. \quad (33,2)$$

Это уравнение — s -й степени по $E^{(1)}$ и имеет, вообще говоря, s различных вещественных корней. Эти корни и представляют собой искомые поправки первого прибли-

жения к собственным значениям. Уравнение (33,2) называют *секулярным*¹⁾.

Подставляя поочередно корни уравнения (33,2) в систему (33,1) и решая последнюю, найдем коэффициенты $c_n^{(0)}$ и, таким образом, определим собственные функции нулевого приближения.

В результате возмущения первоначально вырожденный уровень энергии перестает, вообще говоря, быть вырожденным (корни уравнения (33,2), вообще говоря, различны); как говорят, возмущение «снимает» вырождение. Снятие вырождения может быть как полным, так и частичным (в последнем случае после наложения возмущения остается вырождение меньшей кратности, чем первоначальная).

Задачи

1. Определить поправки первого приближения к собственному значению и правильные функции нулевого приближения для двукратно вырожденного уровня.

Решение. Уравнение (33,2) имеет здесь вид

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

(индексы 1, 2 соответствуют двум произвольно выбранным невозмущенным собственным функциям $\psi_1^{(0)}$ и $\psi_2^{(0)}$ данного двукратно вырожденного уровня). Решая его, находим

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} [V_{11} + V_{22} \pm \hbar\omega^{(1)}], \quad \hbar\omega^{(1)} = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}, \quad (1)$$

где введено обозначение $\hbar\omega^{(1)}$ для разности двух значений поправки $E^{(1)}$. Решая, далее, уравнения (33,1) с этими значениями $E^{(1)}$, получим для коэффициентов в нормированных правильных функциях нулевого приближения $\psi^{(0)} = c_1^{(0)}\psi_1^{(0)} + c_2^{(0)}\psi_2^{(0)}$ значения

$$\begin{aligned} c_1^{(0)} &= \left\{ \frac{V_{12}}{2|V_{12}|} \left[1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}} \right] \right\}^{1/2}, \\ c_2^{(0)} &= \pm \left\{ \frac{V_{21}}{2|V_{12}|} \left[1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}} \right] \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (2)$$

2. В начальный момент времени $t=0$ система находится в состоянии $\psi_1^{(0)}$, относящемся к двукратно вырожденному уровню. Определить вероятность того, что в дальнейший момент времени t система будет

¹⁾ Название заимствовано из небесной механики.

находиться в другом состоянии $\psi_2^{(0)}$ той же энергии; переход происходит под влиянием постоянного возмущения.

Решение. Составляем правильные функции нулевого приближения

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad \psi' = c'_1 \psi_1 + c'_2 \psi_2,$$

где c_1, c_2 и c'_1, c'_2 — две пары коэффициентов, определяемые формулами (2) задачи 1 (индексы 0 у всех величин для краткости опускаем). Обратно:

$$\psi_1 = \frac{c'_2 \psi - c_2 \psi'}{c_1 c'_2 - c'_1 c_2}.$$

Функции ψ и ψ' относятся к состояниям с возмущенными энергиями $E + E^{(1)}$ и $E + E^{(1)'}$, где $E^{(1)}, E^{(1)'}$ — два значения поправки (1) задачи 1. Вводя временные множители, переходим к волновой функции, зависящей от времени:

$$\Psi_1 = \frac{e^{-iEt/\hbar}}{c_1 c'_2 - c'_1 c_2} [c'_2 \psi e^{-iE^{(1)} t/\hbar} - c_2 \psi' e^{-iE^{(1)'} t/\hbar}]$$

(в момент $t=0$ $\Psi_1 = \psi_1$). Наконец, выражая снова ψ, ψ' через ψ_1, ψ_2 , получим Ψ_1 в виде линейной комбинации от ψ_1, ψ_2 с коэффициентами, зависящими от времени. Квадрат модуля коэффициента при ψ_2 определяет искомую вероятность перехода w_{12} . Вычисление с использованием (1) и (2) дает

$$w_{12} = 2 \frac{|V_{12}|^2}{(\hbar \omega^{(1)})^2} [1 - \cos \omega^{(1)} t].$$

Мы видим, что вероятность периодически колеблется с частотой $\omega^{(1)}$.

§ 34. Возмущения, зависящие от времени

Перейдем к изучению возмущений, зависящих явно от времени. Говорить о поправках к собственным значениям энергии в этом случае вообще нельзя, поскольку при зависящем от времени гамильтониане (каковым будет возмущенный оператор $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$) энергия не сохраняется, так что стационарных состояний не существует. Задача заключается здесь в приближенном вычислении волновых функций по волновым функциям стационарных состояний невозмущенной системы.

Для этой цели применим метод, соответствующий известному методу вариации постоянных для решений линейных дифференциальных уравнений ¹⁾. Пусть $\Psi_k^{(0)}$ — волно-

¹⁾ Применение этого метода в квантовой механике принадлежит Дираку (1926).

вые функции (включающие временной множитель) стационарных состояний невозмущенной системы. Тогда произвольное решение невозмущенного волнового уравнения может быть написано в виде суммы $\Psi = \sum a_k \Psi_k^{(0)}$. Будем теперь искать решение возмущенного уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Psi \quad (34,1)$$

в виде суммы

$$\Psi = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)}, \quad (34,2)$$

где коэффициенты разложения являются функциями времени. Подставив (34,2) в (34,1) и помня, что функции $\Psi_k^{(0)}$ удовлетворяют уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k^{(0)}}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_k^{(0)},$$

получим

$$i\hbar \sum_k \Psi_k^{(0)} \frac{da_k}{dt} = \sum_k a_k \hat{V} \Psi_k^{(0)}.$$

Умножив обе стороны равенства слева на $\Psi_m^{(0)*}$ и интегрируя, получим

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) a_k, \quad (34,3)$$

где

$$V_{mk}(t) = \int \Psi_m^{(0)*} \hat{V} \Psi_k^{(0)} dq = V_{mk} e^{i\omega_{mk}t}, \quad \omega_{mk} = \frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})$$

— матричные элементы возмущения, включающие временной множитель (впрочем, при зависящем явно от времени V величины V_{mk} тоже являются функциями времени).

В качестве невозмущенной волновой функции выберем волновую функцию i -го стационарного состояния, чему соответствуют значения коэффициентов в (34,2): $a_i^{(0)} = 1$, $a_k^{(0)} = 0$ при $k \neq i$. Для определения первого приближения ищем a_k в виде $a_k = a_k^{(0)} + a_k^{(1)}$, причем в правую сторону уравнения (34,3) (уже содержащую малые величины V_{mk}) подставляем $a_k = a_k^{(0)}$. Это дает

$$i\hbar \frac{da_k^{(1)}}{dt} = V_{ki}(t). \quad (34,4)$$

Для того чтобы указать, к которой из невозмущенных функций вычисляется поправка, введем второй индекс у коэффициентов a_k , написав

$$\Psi_i = \sum_k a_{ki}(t) \Psi_k^{(0)}. \quad (34,5)$$

Соответственно этому напомним результат интегрирования уравнения (34,4) в виде

$$a_{ki}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int V_{ki}(t) dt = -\frac{i}{\hbar} \int V_{ki} e^{i\omega_{ki}t} dt. \quad (34,6)$$

Этим определяются волновые функции первого приближения.

Выбор пределов в интегралах (34,6) зависит от условий конкретной задачи. Предположим, например, что возмущение действует всего лишь в течение некоторого конечного промежутка времени (или же, что $V(t)$ достаточно быстро затухает при $t \rightarrow \pm \infty$). Пусть перед началом действия возмущения (или в пределе при $t \rightarrow -\infty$) система находилась в i -м стационарном состоянии (дискретного спектра). В произвольный последующий момент времени состояние системы будет определяться функцией (34,5), где в первом приближении

$$\begin{aligned} a_{ki} &= a_{ki}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{ki} e^{i\omega_{ki}t} dt \quad (k \neq i), \\ a_{ii} &= 1 + a_{ii}^{(1)} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{ii} dt. \end{aligned} \quad (34,7)$$

Пределы интегрирования выбраны таким образом, чтобы при $t \rightarrow -\infty$ все $a_{ki}^{(1)}$ обращались в нуль. По истечении времени действия возмущения (или в пределе $t \rightarrow \infty$) коэффициенты a_{ki} принимают постоянные значения $a_{ki}(\infty)$, и система будет находиться в состоянии с волновой функцией

$$\Psi = \sum_k a_{ki}(\infty) \Psi_k^{(0)},$$

снова удовлетворяющей невозмущенному волновому уравнению, но отличной от первоначальной функции $\Psi_i^{(0)}$. Согласно общим правилам, квадрат модуля коэффициента $a_{ki}(\infty)$ определяет вероятность системе иметь энергию $E_k^{(0)}$, т. е. оказаться в k -м стационарном состоянии.

Таким образом, под воздействием возмущения система может перейти из первоначального стационарного состояния в любое другое. Условимся, для единообразия, обозначать здесь и в следующих параграфах начальное состояние индексом i , а конечное — индексом f . Вероятность перехода $i \rightarrow f$ равна

$$W = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{fi} e^{i\omega_{fi}t} dV \right|^2. \quad (34,8)$$

Если возмущение $V(t)$ мало меняется на протяжении промежутков времени порядка периода $1/\omega_{fi}$, то значение интеграла в (34,8) будет очень малым: интеграл погашается наличием в подынтегральном выражении быстро осциллирующего знакопеременного множителя $\exp(i\omega_{fi}t)$. В пределе, при сколь угодно медленном изменении приложенного возмущения, вероятность всякого перехода с изменением энергии (т. е. с отличной от нуля частотой ω_{fi}) стремится к нулю. Таким образом, при достаточно медленном (*адиабатическом*) изменении возмущения система, находившаяся в некотором невырожденном стационарном состоянии, будет продолжать оставаться в том же состоянии.

§ 35. Переходы в непрерывном спектре

Одним из важнейших применений теории возмущений является вычисление вероятности перехода между состояниями непрерывного спектра под влиянием постоянного (не зависящего от времени) возмущения. Сюда относятся различные процессы столкновений; при этом система в начальном и конечном состояниях представляет собой совокупность сталкивающихся частиц, а роль возмущения играет взаимодействие между ними. К категории явлений, обнимаемых излагаемым ниже методом, относятся также процессы, в которых система (находящаяся в некотором своем связанном состоянии) распадается на свободно движущиеся части. Для определенности будем сначала иметь в виду именно этот последний случай ¹⁾.

¹⁾ Строго говоря, состояния дискретного спектра системы, способной к распаду, являются не стационарными, а квазистационарными (см. ниже, § 38); это обстоятельство не существенно для излагаемого здесь рассмотрения, но мы еще вернемся к этому вопросу в § 102.

Обозначим символом ν совокупность величин, пробегающих непрерывный ряд значений, определяющих собой состояния непрерывного спектра. Под $d\nu$ будем понимать произведение дифференциалов этих величин. Невозмущенные волновые функции непрерывного спектра будем предполагать нормированными на δ -функцию «по шкале величин ν » (так, величинами ν могут быть компоненты импульсов свободных частиц; их волновые функции должны быть тогда нормированы на δ -функцию от импульса). С такой нормировкой разложение волновой функции будет иметь вид (вместо (34,2))

$$\Psi = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)} + \int a_\nu(t) \Psi_\nu^{(0)} d\nu, \quad (35,1)$$

где сумма берется по всему дискретному, а интеграл — по непрерывному спектру; при этом $|a_\nu(t)|^2 d\nu$ будет вероятностью нахождения системы (в момент времени t) в состояниях в интервале между ν и $\nu + d\nu$ (ср. § 5).

Итак, пусть в момент времени $t=0$ система находится в начальном состоянии, которое отметим индексом i . Требуется найти вероятность ее перехода в состояние f , в котором величины ν имеют значения в интервале $d\nu_f$.

Изменив соответствующим образом обозначение индексов в (34,6) и произведя интегрирование (при не зависящем от времени V_{fi}), получим

$$a_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{fi} e^{i\omega_{fi}t} dt = V_{fi} \frac{1 - e^{i\omega_{fi}t}}{\hbar\omega_{fi}}. \quad (35,2)$$

Нижний предел интегрирования выбран так, чтобы при $t=0$ было $a_{fi}=0$, в соответствии с поставленным начальным условием.

Квадрат модуля выражения (35,2) равен

$$|a_{fi}|^2 = |V_{fi}|^2 \frac{\sin^2 \frac{\omega_{fi}}{2} t}{\hbar^2 \omega_{fi}^2}. \quad (35,3)$$

Легко видеть, что при больших t стоящая здесь функция пропорциональна t .

Для этого замечаем, что имеет место следующая формула:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi t \alpha^2} = \delta(\alpha). \quad (35,4)$$

Действительно, при $\alpha \neq 0$ написанный предел равен нулю, а при $\alpha = 0$ имеем $\sin^2 \alpha t / \alpha^2 t = t$, так что предел равен бесконечности. Интегрируя же по $d\alpha$ в пределах от $-\infty$ до ∞ (с подстановкой $\alpha t = \xi$), получим

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{t \alpha^2} d\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \xi}{\xi^2} d\xi = 1.$$

Таким образом, функция в левой стороне равенства (35,4) действительно обладает всеми свойствами δ -функции.

Соответственно этой формуле мы можем написать при больших t

$$|a_{fi}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{fi}|^2 \pi t \delta\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right)$$

или (учитывая, что $\delta(\alpha x) = \delta(x)/\alpha$)

$$|a_{fi}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) t. \quad (35,5)$$

Выражение $|a_{fi}|^2 dv_f$ есть вероятность перехода из первоначального состояния в состояния в интервале dv_f . Мы видим, что при больших t оно оказывается пропорциональным истекшему с момента $t=0$ промежутку времени. Без множителя же t это выражение дает вероятность перехода $d\omega$, отнесенную к единице времени (эта величина имеет размерность $1/\text{сек}$, в противоположность безразмерной вероятности (34,7)):

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) dv_f. \quad (35,6)$$

Эта вероятность отлична от нуля лишь для переходов в состояния с энергией $E_f = E_i$ — как и следовало в согласии с законом сохранения энергии. Наличие в (35,6) δ -функции, выражающей этот закон, не означает, конечно, обращения вероятности в бесконечность при $E_f = E_i$, что было бы бессмысленным; в действительности δ -функция устраняется интегрированием по конечному интервалу состояний. Так, если состояния непрерывного спектра не вырождены,

то под dv_f можно понимать значения одной только энергии. Тогда интегрирование (35,6) по $dv_f = dE_f$ приведет к следующему значению вероятности перехода:

$$\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2. \quad (35,7)$$

Формула (35,6) применима и в тех случаях, когда к непрерывному спектру относится также и начальное состояние системы (как это имеет место в задаче о столкновениях; пример такого применения будет дан в § 67). Необходимо отметить, однако, что в таких случаях определяемая формулой (35,6) величина $d\omega$ не является непосредственно вероятностью перехода; она даже не обладает соответствующей размерностью (1/сек). Выражение (35,6) пропорционально числу переходов в единицу, но его размерность и буквальный смысл зависят от способа нормировки начальных волновых функций непрерывного спектра (так, $d\omega$ может оказаться сечением столкновений — см. пример в § 67).

§ 36. Промежуточные состояния

Может оказаться, что матричный элемент V_{fi} для рассматриваемого перехода обращается в нуль. Тогда формула (35,6) не дает ответа на поставленный вопрос и для определения вероятности перехода надо обратиться к следующему приближению теории возмущений.

Вместе с V_{fi} обращается в нуль также и поправка $a_{fi}^{(1)}$. Для поправки же второго порядка $a_{fi}^{(2)}$ уравнения (34,3) дают

$$i\hbar \frac{da_{fi}^{(2)}}{dt} = \sum_k V_{fk} e^{i\omega_{fk}t} a_{ki}^{(1)}, \quad (36,1)$$

где суммирование производится по состояниям, для которых матричные элементы переходов $k \rightarrow f$ отличны от нуля. Поправки же первого порядка $a_{ki}^{(1)}$ определяются уравнениями

$$i\hbar \frac{da_{ki}^{(1)}}{dt} = V_{ki} e^{i\omega_{ki}t}$$

(ср. (34,4)), откуда

$$a_{ki}^{(1)} = -\frac{V_{ki}}{\hbar\omega_{ki}} (e^{i\omega_{ki}t} - 1).$$

Подставив это выражение в (36,1) и проинтегрировав, получим

$$a_{fi}^{(2)} = \frac{i}{\hbar^2} \sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{\omega_{ki}} \int_0^t (e^{i\omega_{fi}t} - e^{i\omega_{fk}t}) dt.$$

В интеграле надо сохранить только первый член, который будет содержать малый знаменатель ω_{fi} . Таким образом,

$$a_{fi}^{(2)} = \left(\sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{\hbar \omega_{ki}} \right) \frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{\hbar \omega_{fi}}.$$

Это выражение отличается от (35,2) лишь заменой матричного элемента V_{fi} на заключенную в скобки сумму. Соответственно вместо (35,6) получим

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{E_i - E_k} \right|^2 \delta(E_f - E_i) dv_f. \quad (36,2)$$

О состояниях k , для которых матричные элементы V_{fk} и V_{ki} отличны от нуля, говорят в этой связи как о *промежуточных* для перехода $i \rightarrow f$. Наглядно, можно сказать, что этот переход осуществляется как бы в два этапа: $i \rightarrow k$ и $k \rightarrow f$ (разумеется, однако, такому описанию не следует придавать буквального смысла).

§ 37. Соотношение неопределенности для энергии

Рассмотрим систему, состоящую из двух слабо взаимодействующих частей. Предположим, что в некоторый момент времени известно, что эти части обладают определенными значениями энергии, которые мы обозначим соответственно как E и ε . Пусть через некоторый интервал времени Δt производится снова измерение энергии; оно даст некоторые значения E' , ε' , вообще говоря, отличные от E , ε . Легко определить, каков порядок величины наиболее вероятного значения разности $E' + \varepsilon' - E - \varepsilon$, которая будет обнаружена в результате измерения.

Согласно формуле (35,3) вероятность перехода системы (за время t) под влиянием не зависящего от времени возмущения из состояния с энергией E в состояние с энергией E'

пропорциональна

$$\frac{1}{(E'-E)^2} \sin^2 \frac{E'-E}{2\hbar} t.$$

Отсюда видно, что наиболее вероятное значение разности $E'-E$ порядка величины $\hbar/t$.

Применив этот результат к рассматриваемому нами случаю (возмущением является взаимодействие между частями системы), мы получим соотношение

$$|E + \epsilon - E' - \epsilon'| \Delta t \sim \hbar. \quad (37,1)$$

Таким образом, чем меньше интервал времени Δt , тем большее изменение энергии будет обнаружено. Существенно, что его порядок величины $\hbar/\Delta t$ не зависит от величины возмущения. Определяемое соотношением (37,1) изменение энергии будет обнаружено даже при сколь угодно слабом взаимодействии между обеими частями системы. Этот результат является чисто квантовым и имеет глубокий физический смысл. Он показывает, что в квантовой механике закон сохранения энергии может быть проверен посредством двух измерений лишь с точностью до величины порядка $\hbar/\Delta t$, где Δt — интервал времени между измерениями.

О соотношении (37,1) часто говорят как о соотношении неопределенности для энергии. Необходимо, однако, подчеркнуть, что его смысл существенно отличается от смысла соотношения неопределенности для координаты и импульса. В последнем Δp и Δx — неопределенности в значениях импульса и координаты в один и тот же момент; соотношение $\Delta p \Delta x \sim \hbar$ показывает, что эти две величины вообще не могут иметь одновременно строго определенных значений. Энергии же E и ϵ , напротив, могут быть измерены в каждый данный момент времени с любой точностью. Величина $(E + \epsilon) - (E' + \epsilon')$ в (37,1) есть разность двух точно измеренных значений энергии $E + \epsilon$ в два различных момента времени, а отнюдь не неопределенность в значении энергии в определенный момент времени.

Если рассматривать E как энергию некоторой системы, а ϵ — как энергию «измерительного прибора», то мы можем сказать, что энергия взаимодействия между ними может быть учтена лишь с точностью до $\hbar/\Delta t$. Обозначим посредством ΔE , $\Delta \epsilon$, ... погрешности в измерениях соответствующих величин. В благоприятном случае, когда ϵ , ϵ'

известны точно ($\Delta e = \Delta e' = 0$), имеем

$$\Delta(E - E') \sim \frac{\hbar}{\Delta t}. \quad (37,2)$$

Из этого соотношения можно вывести важные следствия относительно измерения импульса. Процесс измерения импульса частицы (будем говорить для определенности об электроне) включает в себя столкновение электрона с некоторой другой («измерительной») частицей, импульсы которой до и после столкновения могут считаться известными точно. К этому процессу надо применить закон сохранения импульса и закон сохранения энергии. Последний, однако, может быть применен, как мы видели, лишь с точностью до величины порядка $\hbar/\Delta t$, где Δt — время между началом и концом рассматриваемого процесса.

Для упрощения дальнейших рассуждений удобно рассмотреть идеализированный мысленный эксперимент, в котором «измерительной частицей» является идеально отражающее плоское зеркало; тогда играет роль лишь одна компонента импульса — перпендикулярная к плоскости зеркала. Для определения импульса P частицы законы сохранения импульса и энергии дают уравнения

$$p' + P' - p - P = 0, \quad (37,3)$$

$$|e' + E' - e - E| \sim \frac{\hbar}{\Delta t}. \quad (37,4)$$

(P, E — импульс и энергия частицы, p, e — то же для зеркала; величины без и со штрихами относятся соответственно к моментам до и после столкновения). Величины p, p', e, e' , относящиеся к «измерительной частице», могут рассматриваться как известные точно, т. е. их погрешности равны нулю. Тогда для погрешностей в остальных величинах имеем из написанных уравнений

$$\Delta P = \Delta P', \quad \Delta E' - \Delta E \sim \frac{\hbar}{\Delta t}.$$

Но $\Delta E = (\partial E / \partial P) \Delta P = v \Delta P$, где v — скорость электрона (до столкновения), и аналогично $\Delta E' = v' \Delta P' = v' \Delta P$. Поэтому получаем

$$(v'_x - v_x) \Delta P_x \sim \frac{\hbar}{\Delta t}. \quad (37,5)$$

Мы приписали здесь индексы x у скоростей и импульса с целью подчеркнуть, что это соотношение относится к каждой из их компонент в отдельности.

Это и есть искомое соотношение. Оно показывает, что измерение импульса электрона (при заданной степени точности ΔP) неизбежно связано с изменением его скорости (т. е. и самого импульса). Это изменение тем больше, чем короче длится сам процесс измерения. Изменение скорости может быть сделано сколь угодно малым лишь при $\Delta t \rightarrow \infty$; но измерения импульса, длящиеся в течение большого времени, вообще могут иметь смысл лишь для свободной частицы. Здесь в особенности ярко проявляется неповторимость измерения импульса через короткие промежутки времени, и «двулика» природа измерения в квантовой механике — необходимость различать измеряемые значения величины и значения, создаваемые в результате процесса измерения ¹⁾.

§ 38. Квазистационарные состояния

К произведенному в начале предыдущего параграфа выводу можно подойти и с другой точки зрения, применив его к распаду системы, происходящему под влиянием какого-либо возмущения. Пусть E_0 — некоторый уровень энергии системы, вычисленный при полном пренебрежении возможностью ее распада. Посредством τ обозначим *продолжительность жизни* этого состояния системы, т. е. величину, обратную вероятности w распада в единицу времени:

$$\tau = \frac{1}{w}. \quad (38,1)$$

Тогда тем же способом найдем, что

$$|E_0 - E - \varepsilon| \sim \frac{\hbar}{\tau},$$

где E , ε — энергия обеих частей, на которые распалась система. Но по сумме $E + \varepsilon$ можно судить об энергии системы до распада. Поэтому полученное соотношение показывает, что энергия способной к распаду системы может быть определена лишь с точностью до величины порядка $\hbar/\tau$.

¹⁾ Соотношение (37,5), как и выяснение физического смысла соотношения неопределенности для энергии, принадлежит Бору (1928).

Система, способная к распаду, не обладает, строго говоря, дискретным спектром энергий. Вылетающая из нее при распаде частица уходит на бесконечность; в этом смысле движение системы инфинитно, а потому энергетический спектр непрерывен.

Может, однако, оказаться, что вероятность распада системы очень мала (простейший пример такого рода представляет частица, окруженная достаточно высоким и широким потенциальным барьером). Для таких систем с малой вероятностью распада можно ввести понятие о *квазистационарных* состояниях, в которых частицы движутся в течение длительного времени «внутри системы», покидая ее лишь по истечении значительного промежутка времени. Энергетический спектр этих состояний будет *квазидискретным*; он состоит из ряда размытых уровней, ширины которых определяются их продолжительностями жизни. В качестве количественной характеристики ширины уровня можно принять величину

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} = \hbar\omega. \quad (38,2)$$

Ширины квазидискретных уровней малы по сравнению с расстояниями между ними.

При рассмотрении квазистационарных состояний можно применить следующий формальный метод. До сих пор мы всегда рассматривали решения уравнения Шредингера с граничным условием, требующим конечности волновой функции на бесконечности. Вместо этого будем теперь искать решения, представляющие собой на бесконечности расходящуюся сферическую волну ($\psi \sim e^{ikr}/r$); это соответствует частице, вылетающей в конце концов из системы при ее распаде. Ввиду того что такое граничное условие комплексно, нельзя уже утверждать, что собственные значения энергии должны быть вещественными. Напротив, в результате решения уравнения Шредингера мы получим набор комплексных значений, которые напомним в виде

$$E = E_0 - \frac{i\Gamma}{2}, \quad (38,3)$$

где E_0 и Γ — две положительные величины.

Легко видеть, в чем заключается физический смысл комплексных значений энергии. Временной множитель

волновой функции квазистационарного состояния имеет вид

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar}t}.$$

Поэтому все вероятности, определяющиеся квадратами модуля волновой функции, затухают со временем по закону $e^{-\Gamma t/\hbar}$. В частности, по этому закону затухает и вероятность нахождения частицы «внутри системы».

С широкой категорией квазистационарных состояний мы имеем дело в области ядерных реакций при не слишком больших энергиях, идущих через стадию образования *составного ядра*¹⁾. Наглядная физическая картина происходящих при этом процессов заключается в том, что падающая на ядро частица (например, нейтрон), взаимодействуя с нуклонами ядра, «сливается» с ним, образуя составную систему, в которой привнесенная частицей энергия распределяется между многими нуклонами. Большая (по сравнению с «периодами» движения нуклонов в ядре) продолжительность жизни квазистационарных состояний такой системы связана с тем, что в течение большей части времени энергия распределена между многими частицами, так что каждая из них обладает энергией, недостаточной для того, чтобы вылететь из ядра, преодолев притяжение остальных частиц. Лишь сравнительно редко в одной частице концентрируется достаточно большая энергия, что и приводит к распаду составного ядра.

¹⁾ Представление о составном ядре было выдвинуто *Нильсом Бором* в 1936 г.

Глава V

СПИН

§ 39. Спин

Рассмотрим сложную частицу (скажем, атомное ядро), покоящуюся как целое и находящуюся в определенном внутреннем состоянии. Помимо определенной внутренней энергии, она обладает также и определенным по своей величине L моментом, связанным с движением частиц внутри ядра. При заданном L момент может еще иметь, как мы знаем, $2L+1$ различных ориентаций в пространстве.

В § 18 было указано, что существенный аспект понятия момента в квантовой механике состоит в том, что этой величиной определяются свойства симметрии состояний системы по отношению к поворотам в пространстве. Именно, при поворотах системы координат $2L+1$ волновых функций Ψ_{LM} , отвечающих различным значениям проекции момента M , преобразуются друг через друга по определенному закону.

В такой формулировке становится несущественным вопрос о происхождении момента, и мы приходим естественным образом к представлению о «собственном» моменте, который должен быть приписан частице вне зависимости от того, является ли она «сложной» или «элементарной».

Таким образом, в квантовой механике элементарной частице следует приписывать некоторый «собственный» момент, не связанный с ее движением в пространстве. Это свойство элементарных частиц является специфическим квантовым (исчезающим при переходе к пределу $\hbar \rightarrow 0$), и поэтому принципиально не допускает классической интерпретации ¹⁾.

¹⁾ В частности, было бы совершенно бессмысленным представлять себе «собственный» момент элементарной частицы как результат ее вращения «вокруг своей оси».

Собственный момент частицы называют ее *спином*, в отличие от момента, связанного с движением частицы в пространстве, о котором говорят как об *орбитальном моменте*. Речь может идти при этом как об элементарной частице, так и о частице, хотя и составной, но ведущей себя в том или ином круге явлений как элементарная (например, об атомном ядре). Спин частицы (измеренный, как и орбитальный момент, в единицах $\hbar$) будем обозначать посредством s ¹⁾.

Для частиц, обладающих спином, описание состояния с помощью волновой функции должно определять не только вероятности ее различных положений в пространстве, но и вероятности различных возможных ориентаций ее спина. Другими словами, волновая функция должна зависеть не только от трех непрерывных переменных — координат частицы, но и от одной дискретной *спиновой переменной*, указывающей значение проекции спина на некоторое избранное направление в пространстве (ось z) и пробегающей ограниченное число дискретных значений (которые мы будем далее обозначать буквой σ).

Пусть $\psi(x, y, z; \sigma)$ — такая волновая функция. По существу, она представляет собой совокупность нескольких различных функций координат, отвечающих различным значениям σ ; об этих функциях мы будем говорить как о *спиновых компонентах* волновой функции. При этом интеграл

$$\int |\psi(x, y, z; \sigma)|^2 dV$$

определяет вероятность частице иметь определенное значение σ . Вероятность же частице находиться в элементе объема dV , имея произвольное значение σ , есть

$$\sum_{\sigma} |\psi(x, y, z; \sigma)|^2.$$

Квантовомеханический оператор спина при применении его к волновой функции действует именно на спиновую переменную σ . Другими словами, он каким-то образом преобразует друг через друга компоненты волновой функции. Вид этого оператора будет установлен ниже. Но уже за-

¹⁾ Физическая идея о наличии у электрона собственного момента была высказана Г. Юленбеком и С. Гаудсмитом в 1925 г. В квантовую механику спин был введен Паули в 1927 г.

ранее ясно, что операторы трех компонент спина $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ удовлетворяют тем же правилам коммутации, что и операторы орбитального момента. Общее определение операторов момента в квантовой механике заключено в их связи с операторами бесконечно малых поворотов. При выводе в § 14 выражений этих операторов и затем правил их коммутации подразумевалось, что они действуют на функции координат. Но в действительности эти правила выражают собой свойства поворотов как таковых вне зависимости от того, к какому математическому объекту они применяются, и потому имеют универсальный характер.

Знание правил коммутации дает возможность определить возможные значения величины и компонент спина. Действительно, произведенный в § 15 вывод (формулы (15,6—8)) был основан только на этих правилах, и потому применим и здесь; надо только вместо $\mathbf{L}$ в этих формулах подразумевать теперь $\mathbf{s}$. Из формул (15,6) следует, что собственные значения z -компоненты спина образуют последовательность чисел, отличающихся на единицу. Мы не можем, однако, утверждать теперь, что сами эти значения тоже должны быть целыми, как это имело место для проекции l_z орбитального момента (приведенный в начале § 15 вывод здесь неприменим, поскольку он основан на специфическом для орбитального момента выражении оператора $\hat{l}_z$, действующего на функции координат).

Далее, последовательность собственных значений s_z ограничена сверху и снизу значениями, одинаковыми по величине и противоположными по знаку, которые мы обозначим посредством $\pm s$. Разность $2s$ между наибольшим и наименьшим значениями s_z должна быть целым числом или нулем. Следовательно, число s может иметь значения $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

Таким образом, собственные значения квадрата спина равны

$$s^2 = s(s+1), \quad (39,1)$$

где s может быть либо целым числом (включая значение нуль), либо полуцелым. При заданном s проекция спина может пробегать значения $s_z = \sigma = -s, -s+1, \dots, s$ — всего $2s+1$ значений. Столько же компонент имеет, согласно сказанному выше, волновая функция частицы со спином s ¹⁾.

¹⁾ Поскольку для каждого рода частиц s есть заданное число, то при предельном переходе к классической механике ($\hbar \rightarrow 0$) спин-

Большинство элементарных частиц (в этом числе электроны, протоны, нейтроны, μ -мезоны) обладают спином $1/2$. Существуют также элементарные частицы с другими спинами (так, π -мезоны и K -мезоны имеют спин 0).

Полный момент частицы (будем обозначать его посредством j) складывается из ее орбитального момента l и спина s . Их операторы, действуя на функции различных переменных, разумеется, коммутируют друг с другом.

Собственные значения полного момента

$$j = l + s \quad (39,2)$$

определяются тем же правилом «векторной модели», что и сумма орбитальных моментов двух различных частиц (§ 17). Именно, при заданных значениях l и s полный момент может иметь значения $j = l + s, l + s - 1, \dots, |l - s|$. Так, у электрона (спин $1/2$) с отличным от нуля орбитальным моментом l полный момент может быть равен $j = l \pm 1/2$; при $l = 0$ момент j имеет, конечно, лишь одно значение $j = 1/2$.

Оператор полного момента $\mathbf{J}$ системы частиц равен сумме операторов моментов $\mathbf{j}$ каждой из них, так что его значения определяются снова правилами векторной модели. Момент $\mathbf{J}$ можно представить в виде $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, где $\mathbf{S}$ — суммарный спин, а $\mathbf{L}$ — суммарный орбитальный момент частиц.

Вместе с правилами коммутации имеют универсальный характер (т. е. справедливы для любого момента) также и формулы (15,11) для матричных элементов компонент момента. Остаются справедливыми (с соответствующим изменением обозначений) также и установленные в § 18 правила отбора по моменту для матричных элементов различных физических величин.

§ 40. Оператор спина

Ниже (в этом и в §§ 41, 42) мы не будем интересоваться зависимостью волновых функций от координат. Говоря, например, о поведении волновой функции $\psi(\sigma)$ при повороте системы координат, можно подразумевать, что частица

момент $\hbar s$ обращается в нуль. Для орбитального момента такое рассуждение не имеет смысла, поскольку l может иметь произвольные значения. Переходу к классической механике соответствует одновременное стремление $\hbar$ к нулю и l к бесконечности, так что произведение $\hbar l$ остается конечным.

находится в начале координат, так что ее координаты при таком повороте останутся неизменными и полученные результаты будут характерны именно для поведения функции ψ в зависимости от спиновой переменной σ .

Переменная σ отличается от обычных переменных (координат) своей дискретностью. Наиболее общий вид линейного оператора, действующего на функцию дискретной переменной, есть

$$\hat{f}\psi(\sigma) = \sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'} \psi(\sigma'), \quad (40,1)$$

где $f_{\sigma\sigma'}$ — постоянные величины.

Легко видеть, что эти величины совпадают с матричными элементами оператора $\hat{f}$, определенными по обычному правилу (11,6) по собственным функциям оператора $\hat{s}_z$. Интегрирование по координатам в определении (11,6) заменяется теперь суммированием по дискретной переменной, так что определение матричного элемента принимает вид

$$f_{\sigma_1\sigma_2} = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma_2}^*(\sigma) [\hat{f}\psi_{\sigma_1}(\sigma)]. \quad (40,2)$$

Здесь $\psi_{\sigma_1}(\sigma)$, $\psi_{\sigma_2}(\sigma)$ — собственные функции оператора $\hat{s}_z$, отвечающие собственным значениям $s_z = \sigma_1$ и $s_z = \sigma_2$; каждая такая функция отвечает состоянию, в котором частица обладает определенным значением s_z , т. е. из всех компонент волновой функции отлична от нуля лишь одна ¹⁾:

$$\psi_{\sigma_1}(\sigma) = \delta_{\sigma_1\sigma}, \quad \psi_{\sigma_2}(\sigma) = \delta_{\sigma_2\sigma}. \quad (40,3)$$

Согласно (40,1) имеем

$$\hat{f}\psi_{\sigma_1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma_1}(\sigma') = \sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'} \delta_{\sigma_1\sigma'} = f_{\sigma\sigma_1},$$

и после подстановки, вместе с $\psi_{\sigma_2}(\sigma)$, в (40,2) последнее равенство удовлетворяется тождественно, чем и доказывается сделанное утверждение.

¹⁾ Более точно надо было бы писать

$$\psi_{\sigma_1}(x, y, z; \sigma) = \psi(x, y, z) \delta_{\sigma_1\sigma}, \dots;$$

в (40,3) опущены несущественные в данной связи координатные множители.

Подчеркнем лишний раз необходимость отличать заданное собственное значение s_z (σ_1 или σ_2) от независимой переменной σ !

Таким образом, операторы, действующие на волновые функции частицы со спином s , могут быть представлены в виде $(2s+1)$ -рядных матриц. В частности, для операторов самого спина имеем

$$\hat{s}_x \psi(\sigma) = \sum_{\sigma'} (s_x)_{\sigma\sigma'} \psi(\sigma'), \dots \quad (40,4)$$

Согласно сказанному выше (конец § 39), матрицы $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ совпадают с полученными в § 15 матрицами величин L_x , L_y , L_z , причем надо только заменить в формулах (15,11) буквы L и M буквами s и σ . Тем самым мы определили операторы спина.

В важнейшем случае спина $1/2$ ($s=1/2$, $\sigma=\pm 1/2$) эти матрицы двухрядны. Их записывают в виде

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} \sigma_x, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2} \sigma_y, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \sigma_z, \quad (40,5)$$

где¹⁾

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (40,6)$$

Матрицы (40,6) называют *матрицами Паули*. Отметим, что матрица s_z диагональна, как и должно быть для матрицы, определенной по собственным функциям самого оператора $\hat{s}_z$.

§ 41. Спиноры

Перейдем к более подробному изучению «спиновых» свойств волновых функций.

Волновая функция частицы со спином 0 имеет всего одну компоненту, не меняющуюся при поворотах системы координат, т. е. является скаляром.

Для волновых функций частиц с отличным от нуля спина отметим прежде всего их поведение при поворотах вокруг оси z . Оператор бесконечно малого поворота на угол $\delta\varphi$

¹⁾ В записи матриц в виде таблиц (40,6) строки и столбцы нумеруются значениями σ , причем номер строки соответствует первому, а номер столбца — второму индексу матричного элемента. В данном случае эти номера: $1/2, -1/2$. Действие оператора согласно правилу (40,1) означает перемножение σ -й строки матрицы с компонентами волновой функции, расположенными в «столбик»: $\psi = \begin{pmatrix} \psi(1/2) \\ \psi(-1/2) \end{pmatrix}$.

вокруг оси z выражается с помощью оператора момента (в данном случае — спина) в виде $1 + i\delta\varphi \cdot \hat{s}_z$. Поэтому в результате поворота функции $\psi(\sigma)$ перейдут в $\psi(\sigma) + \delta\psi(\sigma)$, где

$$\delta\psi(\sigma) = i\delta\varphi \cdot \hat{s}_z \psi(\sigma).$$

Но $\hat{s}_z$ — диагональная матрица, а ее диагональные элементы совпадают с собственными значениями $s_z = \sigma$. Поэтому $\hat{s}_z \psi(\sigma) = \sigma \psi(\sigma)$, так что

$$\delta\psi(\sigma) = i\sigma\psi(\sigma) \cdot \delta\varphi.$$

Переписав это равенство в виде дифференциального уравнения $d\psi/d\varphi = i\sigma\psi$ и проинтегрировав его, найдем значение функции $\psi(\sigma)$ после поворота на любой конечный угол φ ; обозначив это значение штрихом у функции, получим

$$\psi(\sigma)' = \psi(\sigma) e^{i\sigma\varphi}. \quad (41,1)$$

В частности, при повороте на угол $\varphi = 2\pi$ все компоненты $\psi(\sigma)$ умножаются на одинаковый множитель

$$e^{2\pi i\sigma} = (-1)^{2\sigma} = (-1)^{2s}$$

(числа 2σ имеют, очевидно, всегда ту же четность, что и $2s$). Таким образом, при полном повороте системы координат вокруг оси волновые функции частицы с целым спином возвращаются к своему первоначальному значению, а волновые функции частиц с полуцелым спином меняют свой знак.

Волновые функции частицы со спином $1/2$ (скажем, электрона) имеют две компоненты: $\psi(1/2)$ и $\psi(-1/2)$. Для удобства дальнейших обобщений обозначим эти компоненты с помощью расположенного сверху индекса, пробегающего значения 1 и 2, причем

$$\psi^1 = \psi(1/2), \quad \psi^2 = \psi(-1/2). \quad (41,2)$$

При произвольном повороте системы координат ψ^1 и ψ^2 преобразуются друг через друга, т. е. подвергаются линейному преобразованию:

$$\psi^{1'} = \alpha\psi^1 + \beta\psi^2, \quad \psi^{2'} = \gamma\psi^1 + \delta\psi^2. \quad (41,3)$$

Коэффициенты $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, вообще говоря, комплексны и являются функциями углов поворота. Они связаны друг с другом определенными соотношениями, которые будут выведены ниже.

Рассмотрим систему двух электронов (с равным нулю орбитальным моментом относительного движения). Ее суммарный спин может быть равен $S=0$ или $S=1$. В первом случае система как целое ведет себя как частица со спином 0, так что ее волновая функция должна быть скаляром. С другой стороны, если считать частицы невзаимодействующими, то волновая функция системы должна выражаться через произведения волновых функций каждой из частиц в отдельности (которые обозначим через ψ и φ). Легко видеть, что она должна быть составлена из компонент ψ и φ как билинейная форма

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^1 \varphi^2 - \psi^2 \varphi^1), \quad (41,4)$$

антисимметричная по индексам 1, 2. Действительно, простое вычисление с помощью (41,3) дает

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^{1'} \varphi^{2'} - \psi^{2'} \varphi^{1'}) = (\alpha\delta - \beta\gamma) \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^1 \varphi^2 - \psi^2 \varphi^1),$$

т. е. величина (41,4) при повороте системы координат преобразуется сама через себя. Это и значит, что она является скаляром, причем должно быть

$$\alpha\delta - \beta\gamma = 1. \quad (41,5)$$

Это и есть одно из искоемых соотношений.

Должно, очевидно, быть скаляром также и выражение

$$|\psi^1|^2 + |\psi^2|^2 = \psi^1 \psi^{1*} + \psi^2 \psi^{2*},$$

определяющее вероятность нахождения электрона в данной точке пространства. Сравнивая его со скаляром (41,4), мы видим, что компоненты ψ^{1*} , ψ^{2*} комплексно сопряженной с ψ^1 , ψ^2 волновой функции должны преобразовываться соответственно как ψ^2 , $-\psi^1$, т. е. должно быть

$$\psi^{1*'} = \delta \psi^{1*} - \gamma \psi^{2*}, \quad \psi^{2*'} = -\beta \psi^{1*} + \alpha \psi^{2*}.$$

Написав, с другой стороны, равенства, комплексно сопряженные с (41,3):

$$\psi^{1*'} = \alpha^* \psi^{1*} + \beta^* \psi^{2*}, \quad \psi^{2*'} = \gamma^* \psi^{1*} + \delta^* \psi^{2*},$$

и сравнив их с предыдущими, найдем, что коэффициенты α , β , γ , δ связаны друг с другом еще и соотношениями

$$\alpha = \delta^*, \quad \beta = -\gamma^*. \quad (41,6)$$

В силу соотношений (41,5—6) четыре комплексные величины α , β , γ , δ содержат в действительности всего три независимых вещественных параметра, — как раз столько, сколькими углами определяется поворот трехмерной системы координат.

Двухкомпонентную величину $\psi = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{pmatrix}$, преобразующуюся при поворотах системы координат по закону (41,3), называют *спинором 1-го ранга*, или просто *спинором*. Таким образом, волновая функция частицы со спином $1/2$ представляет собой спинор.

Вернемся к системе из двух электронов и рассмотрим теперь ее состояния со спином $S=1$. Ее волновая функция должна иметь три компоненты, отвечающие проекциям спина $+1$, 0 , -1 . Ими являются выражения, составленные из произведений компонент спиноров ψ и φ , симметричные по своим индексам и преобразующиеся друг через друга при преобразованиях (41,3):

$$\psi^1\varphi^1, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^1\varphi^2 + \psi^2\varphi^1), \quad \psi^2\varphi^2. \quad (41,7)$$

Проекция σ полного спина системы равна сумме проекций спинов обоих электронов. Поэтому соответствие функций (41,7) со значениями σ очевидно из смысла спинорных индексов 1 и 2, указывающих значения проекций спинов отдельных электронов: первая из этих функций имеет два индекса 1 и потому отвечает проекции $\sigma = 1/2 + 1/2 = 1$; вторая имеет по одному индексу 1 и 2, так что $\sigma = 1/2 - 1/2 = 0$; наконец, для третьей с ее двумя индексами 2 имеем $\sigma = -1/2 - 1/2 = -1$.

«Спиновые» свойства волновых функций, будучи по существу их свойствами по отношению к поворотам системы координат, разумеется, тождественны для одной частицы со спином 1 и для системы частиц с таким же полным спином. Поэтому результат (41,7) имеет и более общий характер: волновая функция всякой частицы со спином 2 является, как говорят, *симметричным спинором 2-го ранга*. Спинором 2-го ранга называется, вообще, совокупность четырех величин ψ^{11} , ψ^{22} , ψ^{12} , ψ^{21} , преобразующихся при поворотах системы координат как произведения соответствующих компонент двух спиноров 1-го ранга (но, конечно, отнюдь не обязательно фактически сводящихся к таким про-

изведениям)¹⁾. У симметричного спинора 2-го ранга $\psi^{12} = \psi^{21}$, так что он имеет всего три независимые компоненты²⁾. Их соответствие с компонентами волновой функции $\psi(\sigma)$ устанавливается формулами:

$$\psi(1) = \psi^{11}, \quad \psi(0) = \sqrt{2} \psi^{12}, \quad \psi(-1) = \psi^{22}. \quad (41,8)$$

Волновая функция частицы со спином 1 может быть представлена и как трехмерный вектор ψ . Это очевидно уже из того, что трехмерный вектор есть совокупность того же числа (трех) величин, преобразующихся друг через друга при поворотах системы координат. Соответствие между компонентами симметричного спинора 2-го ранга и компонентами вектора устанавливается следующими формулами:

$$\psi^{11} = -(\psi_x - i\psi_y), \quad \psi^{22} = \psi_x + i\psi_y, \quad \psi^{12} = \psi_z. \quad (41,9)$$

Их смысл состоит в том, что стоящие в левых сторонах равенства компоненты спинора преобразуются по тому же закону, что и стоящие в правых сторонах комбинации компонент вектора. В правильности этого соответствия можно убедиться на примере поворота вокруг оси z , для которого закон преобразования спиноров получается из (41,1)³⁾. С другой стороны, из общезвестного закона преобразования компонент вектора при произвольном повороте осей координат, сравнением по формулам (41,9), можно найти общий закон преобразования спиноров (т. е. зависимость коэффициентов преобразования (41,3) от углов поворота); мы не будем останавливаться здесь на этом.

¹⁾ Подобно тому, как тензор второго ранга — совокупность величин, преобразующихся как произведения компонент вектора.

²⁾ Антисимметричный же спинор 2-го ранга содержит всего одну независимую компоненту ($\psi^{11} = \psi^{22} = 0$, $\psi^{12} = -\psi^{21}$). Ее свойства совпадают со свойствами рассмотренной выше величины (41,4). Другими словами, антисимметричный спинор 2-го ранга сводится к скаляру.

³⁾ Согласно (41,1) и (41,2) имеем

$$\psi^{1'} = e^{i\varphi/2} \psi^1, \quad \psi^{2'} = e^{-i\varphi/2} \psi^2,$$

где $\psi^{1'}$, $\psi^{2'}$ — компоненты спинора в системе координат, повернутой относительно первоначальной системы на угол φ вокруг оси z . Для компонент спинора 2-го ранга имеем поэтому

$$\psi^{11'} = e^{i\varphi} \psi^{11}, \quad \psi^{12'} = \psi^{12}, \quad \psi^{22'} = e^{-i\varphi} \psi^{22}.$$

Таковыми же формулами связаны друг с другом компоненты вектора $\psi_x - i\psi_y$, ψ_z , $\psi_x + i\psi_y$ в обеих системах координат.

Наконец, в общем случае частицы с произвольным спином волновая функция представляет собой симметричный по всем своим индексам спинор ранга $2s$. Легко видеть, что число независимых компонент такого спинора равно, как и должно быть, $2s+1$. Действительно, поскольку порядок расположения индексов у симметричного спинора несуществен, то различными будут лишь компоненты среди индексов, которых имеется $2s$ единиц и 0 двоек, $2s-1$ единиц и 1 двойка, и т. д. до 0 единиц и $2s$ двоек ¹⁾.

§ 42. Поляризация электронов

Важное свойство, специфическое для частиц со спином $1/2$ (будем говорить — электронов), состоит в том, что если состояние электрона описывается некоторой волновой функцией, то существует такое направление в пространстве, вдоль которого проекция спина имеет определенное значение $s_z = 1/2$. Это направление можно назвать направлением *поляризации* электрона, а об электроне в таком состоянии говорят, что он *полностью поляризован*.

Действительно, надлежащим выбором направления оси z всегда можно обратить в нуль одну из компонент (например ψ^2) заданного спинора $\psi = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{pmatrix}$ — волновой функции частицы со спином $1/2$. Это очевидно уже из того, что направление в пространстве определяется двумя величинами (например, двумя углами сферической системы координат), т. е. число имеющихся в нашем распоряжении параметров как раз равно числу величин (вещественная и мнимая части комплексного ψ^2), которые мы хотим обратить в нуль. Равенство же $\psi^2 = 0$ означает обращение в нуль вероятности собственного значения $s_z = -1/2$. Отметим, что для частицы со спином $s > 1/2$ обратить тем же способом все, кроме одной, компоненты волновой функции в нуль было бы невозможно — их число слишком велико.

¹⁾ По математической терминологии говорят, что симметричные спиноры рангов 1, 2, 3, ... осуществляют собой все неприводимые представления группы вращений (ср. примечание на стр. 65). Размерность этих представлений равна $2s+1$ и пробегает все значения 1, 2, 3, ..., когда $s=0, 1/2, 1, \dots$. Представления, осуществляемые собственными функциями орбитального момента ψ_{LM} (о которых шла речь в § 18), — частный случай, отвечающий размерностям 1, 3, 5 ...

Пусть ось z выбрана в направлении поляризации электрона. Вдоль нее же будет, очевидно, направлен и средний вектор спина $\bar{s}$, причем по величине он равен $1/2$. Определим вероятности $w_{\pm}$ значений $s_z = \pm 1/2$ проекции спина на другое направление (ось z'), наклоненное под углом θ к оси z . Проецируя $\bar{s}$ на ось z' , найдем, что среднее значение спина вдоль этой оси есть $\bar{s}_{z'} = 1/2 \cos \theta$. С другой стороны, по определению вероятностей $w_{\pm}$ имеем

$$\bar{s}_{z'} = \frac{1}{2} (w_+ - w_-).$$

Учитывая также, что $w_+ + w_- = 1$, найдем

$$w_+ = \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad w_- = \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (42,1)$$

Наряду с полностью поляризованным, существуют и такие состояния электрона, которые можно назвать *частично поляризованными*. Эти состояния описываются (в отношении своих спиновых свойств) не волновыми функциями, а лишь матрицами плотности, т. е. они являются смешанными (по спину) состояниями (аналогичные понятия для состояний орбитального движения частиц были введены в § 7).

Мы придем естественным образом к способу описания таких состояний, рассмотрев сначала определение среднего вектора спина в чистом состоянии (состояние полной поляризации). По определению операторов физических величин, для состояния с волновой функцией ψ имеем ¹⁾

$$\bar{s} = \sum_{\alpha} \psi^{\alpha*} (\hat{s} \psi^{\alpha}), \quad (42,2)$$

где суммирование по спиновой переменной σ представлено в виде суммирования по компонентам спинора; буквами α, β мы обозначаем в этом параграфе спинорные индексы, пробегающие значения 1 и 2. Обозначим также жирной буквой σ «матричный вектор», компоненты которого — матрицы Пау-

¹⁾ Напомним, что в этом параграфе (как и в §§ 40, 41) мы не интересуемся координатной зависимостью волновых функций и потому в (42,2) не пишем интегрирования по пространству. Спинор ψ предполагается при этом нормированным условием

$$|\psi^1|^2 + |\psi^2|^2 = 1.$$

ли $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. Согласно (40,1) действие оператора спина $\hat{s} = 1/2 \sigma$ означает преобразование

$$\hat{s}\psi^\alpha = \frac{1}{2} \sum_{\beta} \sigma^{\alpha\beta} \psi^\beta,$$

где $\sigma^{\alpha\beta}$ — элементы матриц. Поэтому можно записать выражение (42,2) в виде

$$\bar{s} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \rho^{\beta\alpha} \sigma^{\alpha\beta}, \quad (42,3)$$

где

$$\rho^{\beta\alpha} = \psi^\beta \psi^{\alpha*}. \quad (42,4)$$

Очевидно, что

$$(\rho^{\alpha\beta})^* = \rho^{\beta\alpha}, \quad (42,5)$$

а в силу условия нормировки волновых функций

$$\rho^{11} + \rho^{22} = 1. \quad (42,6)$$

В общем же случае частичной поляризации состояние электрона описывается *поляризационной матрицей плотности*

$$\rho^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \rho^{11} & \rho^{12} \\ \rho^{21} & \rho^{22} \end{pmatrix},$$

удовлетворяющей условиям (42,5—6) и определяющей $\bar{s}$ согласно (42,3); в отличие от чистого состояния, однако, элементы этой матрицы не распадаются на произведения (42,4). Абсолютная величина вектора $\bar{s}$ может иметь значения от 0 до $1/2$. Значение $1/2$ отвечает полной поляризации, а значение 0 — обратному случаю неполяризованного состояния.

Четыре комплексные величины $\rho^{\alpha\beta}$ эквивалентны восьми вещественным параметрам, но в силу пяти соотношений (42,5—6) лишь три из них независимы. Столько же величин (компонент) содержит и вещественный вектор $\bar{s}$. Ясно поэтому, что те и другие определяют друг друга взаимно однозначным образом. Другими словами, поляризационное состояние частицы со спином $1/2$ полностью определяется заданием среднего вектора спина.

Среднее значение z -компоненты спина

$$\bar{s}_z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sigma_z^{\alpha\beta} \rho^{\beta\alpha} = \frac{1}{2} (\rho^{11} - \rho^{22}).$$

Отсюда видно, что ρ^{11} и ρ^{22} — вероятности собственных значений $s_z = 1/2$ и $s_z = -1/2$. Величина же ρ^{12} связана со средними значениями s_x и s_y . Воспользовавшись матрицами σ_x , σ_y из (40,6), легко убедиться в том, что

$$\rho^{12} = \bar{s}_x - i\bar{s}_y.$$

§ 43. Частица в магнитном поле

Частица со спином обладает также и определенным «собственным» магнитным моментом μ . Соответствующий ему квантовомеханический оператор пропорционален оператору $\hat{s}$, т. е. может быть записан в виде

$$\hat{\mu} = \mu \frac{\hat{s}}{s}, \quad (43,1)$$

где s — величина спина частицы, а μ — характерная для частицы постоянная. Собственные значения проекции магнитного момента равны $\mu_z = \mu s/s$. Отсюда видно, что коэффициент μ (который и называют обычно просто величиной магнитного момента) представляет собой наибольшее возможное значение μ_z , достигаемое при $\sigma = s$.

Отношение $\mu/\hbar s$ дает отношение собственного магнитного момента частицы к ее собственному механическому моменту (когда оба направлены по оси z). Как известно, для обычного (орбитального) момента это отношение равно $e/2mc$ (см. I § 66). Коэффициент же пропорциональности между собственным магнитным моментом и спином частицы оказывается иным. Для электрона он равен $-|e|/mc$, т. е. вдвое больше обычного значения (мы увидим в дальнейшем, что такое значение получается теоретически из релятивистского волнового уравнения Дирака). Собственный магнитный момент электрона (спин $1/2$) равен, следовательно, $-\mu_B$, где

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/гаусс}. \quad (43,2)$$

Эту величину называют *магнетоном Бора*.

Магнитный момент тяжелых частиц принято измерять в ядерных магнетонах, определяемых как $e\hbar/2m_p c$, где m_p — масса протона. Эксперимент дает для собственного магнитного момента протона значение 2,79 ядерных магнетонов, причем момент направлен по спину. Магнитный момент нейтрона направлен противоположно спину и равен 1,91 ядерного магнетона.

Обратим внимание на то, что величины μ и s , стоящие в обоих сторонах равенства (43,1), как и следовало, одинаковы по своему векторному характеру: обе являются аксиальными векторами (обе определяются векторными произведениями двух полярных векторов). Аналогичное же равенство для электрического дипольного момента $\mathbf{d}$ ($\mathbf{d} = \text{const} \cdot \mathbf{s}$) противоречило бы симметрии по отношению к инверсии координат: при инверсии менялся бы относительный знак обеих сторон равенства ¹⁾.

Выясним, как должно быть записано уравнение Шредингера для частицы, движущейся как в электрическом, так и в магнитном внешнем поле.

В классической теории функция Гамильтона заряженной частицы в электромагнитном поле имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi,$$

где Φ — скалярный, $\mathbf{A}$ — векторный потенциалы поля, а $\mathbf{p}$ — обобщенный импульс частицы (см. I § 43). Если частица не обладает спином, то переход к квантовой механике производится обычным образом: обобщенный импульс надо заменить оператором $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$, и мы получим гамильтониан ²⁾

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi. \quad (43,3)$$

¹⁾ Отметим, что это равенство (а тем самым и существование электрического момента у элементарной частицы) противоречило бы также и симметрии по отношению к обращению времени: изменение знака времени не меняет электрический момент, но меняет знак спина (как это очевидно, например, из определения этих величин при орбитальном движении: в определении $\mathbf{d}$ входят лишь координаты, а в определение магнитного момента — также и скорость частицы).

²⁾ Мы обозначаем здесь обобщенный импульс той же буквой $\mathbf{p}$, что и обычный импульс (вместо $\mathbf{P}$ в I § 43), с целью подчеркнуть, что ему отвечает тот же оператор.

Если же частица обладает спином, то такая операция недостаточна. Дело в том, что собственный магнитный момент частицы непосредственно взаимодействует с магнитным полем. В классической функции Гамильтона это взаимодействие вообще отсутствует, поскольку сам спин, будучи чисто квантовым эффектом, исчезает при переходе к классическому пределу. Правильное выражение для гамильтониана получится путем введения в (43,3) дополнительного члена $-\hat{\mu}\mathbf{H}$, соответствующего энергии магнитного момента μ в поле $\mathbf{H}$ ¹⁾. Таким образом, гамильтониан частицы, обладающей спином и находящейся в магнитном поле, имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \hat{\mu}\mathbf{H}. \quad (43,4)$$

Уравнение $\hat{H}\psi = E\psi$ для собственных значений этого оператора и представляет собой искомое обобщение уравнения Шредингера на случай движения в магнитном поле. Волновая функция ψ в этом уравнении — спинор ранга $2s+1$.

§ 44. Движение в однородном магнитном поле

Определим уровни энергии электрона в постоянном однородном магнитном поле.

Выберем ось z в направлении поля $\mathbf{H}$, а векторный потенциал поля напомним в виде

$$A_x = -Hy, \quad A_y = A_z = 0 \quad (44,1)$$

(легко проверить, что $\text{rot } \mathbf{A}$ действительно совпадает с $\mathbf{H}$). Тогда гамильтониан (43,4) для электрона (с зарядом $e = -|e|$ и магнитным моментом $\mu = -\mu_B$) принимает вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - \frac{eH}{mc} \hat{s}_z. \quad (44,2)$$

Прежде всего замечаем, что оператор $\hat{s}_z$ коммутативен с гамильтонианом (поскольку последний не содержит операторов других компонент спина). Это значит, что z -проекция спина сохраняется, и потому $\hat{s}_z$ можно заменить собственным значением $s_z = \sigma$. После этого спиновая зависи-

¹⁾ Обозначение величины поля и гамильтониана одинаковой буквой не может привести здесь к недоразумениям; гамильтониан снабжен шляпкой над буквой.

мость волновой функции становится несущественной и ψ в уравнении Шредингера можно понимать как обычную координатную функцию. Для этой функции имеем уравнение

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] \psi - \frac{eH}{mc} \psi = E\psi. \quad (44,3)$$

Гамильтониан (44,2) не содержит явно координат x и z . Поэтому с ним коммутативны также и операторы $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_z$ (дифференцирования по x и z), т. е. x - и z -компоненты обобщенного импульса сохраняются. Соответственно этому ищем ψ в виде

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} (p_x x + p_z z)} \chi(y). \quad (44,4)$$

Собственные значения p_x и p_z пробегает все значения от $-\infty$ до ∞ . Поскольку $A_z = 0$, то z -компонента обобщенного импульса p_z совпадает с компонентой обычного импульса: $p_z = mv_z$. Таким образом, скорость электрона в направлении поля может иметь произвольное значение; можно сказать, что движение вдоль поля «не квантуется».

Подставив (44,4) в (44,3), получим следующее уравнение для функции χ :

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \omega_H \sigma - \frac{p_z^2}{2m} - \frac{m}{2} \omega_H^2 (y - y_0)^2 \right] \chi = 0,$$

где введены обозначения $y_0 = -cp_x/eH$ и

$$\omega_H = \frac{|e|\hbar H}{mc}. \quad (44,5)$$

Это уравнение по форме совпадает с уравнением Шредингера (25,6) для линейного осциллятора, колеблющегося с частотой ω_H около точки $y = y_0$. Поэтому мы сразу можем заключить, что постоянная $(E - \sigma\omega_H - p_z^2/2m)$, играющая роль энергии осциллятора, может принимать значения $(n + 1/2)\hbar\omega_H$, где n — целые числа.

Таким образом, получаем следующее выражение для уровней энергии электрона в однородном магнитном поле:

$$E = \left(n + \frac{1}{2} + \sigma \right) \hbar\omega_H + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (44,6)$$

Первый член в (44,6) дает дискретные значения энергии, отвечающие движению в плоскости, перпендикулярной полю; их называют *уровнями Ландау*¹⁾.

¹⁾ Эта задача была впервые рассмотрена Ландау (1930) в связи с проблемой диамагнетизма электронов в металле.

Глава VI

ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

§ 45. Принцип неразличимости одинаковых частиц

В классической механике одинаковые частицы (скажем, электроны), несмотря на тождественность их физических свойств, не теряют все же своей «индивидуальности»: можно представить себе частицы, входящие в состав данной физической системы, в некоторый момент времени «перенумерованными» и в дальнейшем следить за движением каждой из них по своей траектории; тогда в любой момент времени частицы можно будет идентифицировать.

В квантовой же механике положение совершенно меняется. Уже неоднократно указывалось, что, в силу принципа неопределенности, понятие о траектории электрона полностью теряет смысл. Если положение электрона точно известно в настоящий момент времени, то уже в следующий момент его координаты вообще не имеют никакого определенного значения. Поэтому, локализовав электроны и перенумеровав их в некоторый момент времени, мы этим ничего не добьемся для целей их идентификации в дальнейшие моменты времени; локализовав один из электронов в другой момент времени в некоторой точке пространства, мы не сможем указать, какой именно из электронов попал в эту точку.

Таким образом, в квантовой механике принципиально не существует никакой возможности следить в отдельности за каждой из одинаковых частиц и тем самым различать их. Можно сказать, что в квантовой механике одинаковые частицы полностью теряют свою «индивидуальность». Одинаковость частиц по их физическим свойствам имеет здесь весьма глубокий характер — она приводит к полной неразличимости частиц.

Этот, как говорят, *принцип неразличимости* одинаковых частиц играет основную роль в квантовой теории систем, состоящих из одинаковых частиц. Начнем с рассмотрения системы, состоящей всего из двух частиц. В силу их тождественности, состояния системы, получающиеся друг из друга просто перестановкой обеих частиц, должны быть физически полностью эквивалентными. Это значит, что в результате такой перестановки волновая функция системы может измениться только на несущественный фазовый множитель. Пусть $\psi(\xi_1, \xi_2)$ — волновая функция системы, причем ξ_1, ξ_2 условно обозначают совокупности трех координат и проекции спина каждой из частиц. Тогда должно быть

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = e^{i\alpha} \psi(\xi_2, \xi_1),$$

где α — некоторая вещественная постоянная. В результате повторной перестановки мы вернемся к исходному состоянию, между тем как функция ψ окажется умноженной на $e^{2i\alpha}$. Отсюда следует, что $e^{2i\alpha} = 1$ или $e^{i\alpha} = \pm 1$. Таким образом, $\psi(\xi_1, \xi_2) = \pm \psi(\xi_2, \xi_1)$.

Мы приходим к результату, что имеется всего две возможности — волновая функция либо симметрична (т. е. совершенно не меняется в результате перестановки частиц), либо антисимметрична (т. е. при перестановке меняет знак). Очевидно, что волновые функции всех состояний одной и той же системы должны иметь одинаковую симметрию; в противном случае волновая функция состояния, представляющего собой суперпозицию состояний различной симметрии, была бы ни симметрична, ни антисимметрична.

Этот результат непосредственно обобщается на системы, состоящие из произвольного числа одинаковых частиц. Действительно, в силу одинаковости частиц ясно, что если какая-либо их пара обладает свойством описываться, скажем, симметричными волновыми функциями, то и всякая другая пара таких же частиц будет обладать тем же свойством. Поэтому волновая функция одинаковых частиц должна либо совершенно не меняться при перестановке любой пары частиц (а потому и при всякой вообще взаимной перестановке частиц), либо менять знак при перестановке каждой пары. В первом случае говорят о *симметричной*, а во втором случае — об *антисимметричной* волновой функции.

Свойство описываться либо симметричными, либо антисимметричными волновыми функциями зависит от рода частиц. О частицах, описывающихся антисимметричными функциями, говорят, как о подчиняющихся *статистике Ферми — Дирака* или о *фермионах*, а о частицах, описывающихся симметричными функциями, — как подчиняющихся *статистике Бозе — Эйнштейна* или о *бозонах*¹⁾.

Мы увидим в дальнейшем (§ 87), что из законов релятивистской квантовой механики следует однозначная связь между статистикой, которой подчиняются частицы, и их спином: частицы с полуцелым спином являются фермионами, а частицы с целым спином — бозонами.

Статистика сложных частиц определяется четностью числа входящих в их состав элементарных фермионов. Действительно, перестановка двух одинаковых сложных частиц эквивалентна одновременной перестановке нескольких пар одинаковых элементарных частиц. Перестановка бозонов не изменяет волновой функции вообще, а перестановка фермионов меняет ее знак. Поэтому сложные частицы, содержащие нечетное число элементарных фермионов, подчиняются статистике Ферми, а содержащие четное число их, — статистике Бозе. Этот результат находится, конечно, в согласии с указанным выше общим правилом: сложная частица имеет целый или полуцелый спин в зависимости от того, четно или нечетно число входящих в ее состав частиц с полуцелым спином.

Так, атомные ядра с нечетным атомным весом (т. е. состоящие из нечетного числа протонов и нейтронов) подчиняются статистике Ферми, а с четным весом — статистике Бозе. Для атомов же, содержащих наряду с ядрами также и электроны, статистика определяется, очевидно, четностью или нечетностью суммы атомного веса и атомного номера.

Рассмотрим систему, состоящую из N одинаковых частиц, взаимодействием которых друг с другом можно пренебречь. Пусть $\psi_1, \psi_2, \dots$ — волновые функции различных

¹⁾ Эта терминология связана с названием статистик, которыми описывается идеальный газ, состоящий из частиц, соответственно, с антисимметричными или симметричными волновыми функциями. В действительности мы имеем здесь дело не только с различными статистиками, но и по существу с различными механиками. Статистика Ферми была предложена *Энрико Ферми* для электронов в 1926 г., а ее связь с квантовой механикой была выяснена *Дираком* (1926). Статистика Бозе была предложена *Д. Бозе* для световых квантов и обобщена *Эйнштейном* (1924).

стационарных состояний, в которых может находиться каждая из частиц в отдельности. Состояние системы в целом можно определять перечислением номеров состояний, в которых находятся отдельные частицы. Возникает вопрос о том, каким образом должна быть составлена из функций $\psi_1, \psi_2, \dots$ волновая функция ψ всей системы в целом.

Пусть $p_1, p_2, \dots, p_N$ — номера состояний, в которых находятся отдельные частицы (среди этих номеров могут быть и одинаковые). Для системы бозонов волновая функция $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ выражается суммой произведений вида

$$\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \dots \psi_{p_N}(\xi_N), \quad (45,1)$$

со всеми возможными перестановками различных индексов $p_1, p_2, \dots$; такая сумма обладает, очевидно, требуемым свойством симметрии. Так, для системы из двух частиц, находящихся в различных ($p_1 \neq p_2$) состояниях,

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) + \psi_{p_1}(\xi_2) \psi_{p_2}(\xi_1)]. \quad (45,2)$$

Множитель $1/\sqrt{2}$ введен для нормировки (все функции $\psi_1, \psi_2, \dots$ взаимно ортогональны и предполагаются нормированными). В общем же случае системы произвольного числа N частиц нормированная волновая функция

$$\psi = \left(\frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \dots \psi_{p_N}(\xi_N), \quad (45,3)$$

где сумма берется по всем перестановкам различных индексов $p_1, p_2, \dots, p_N$, а числа N_i указывают, сколько из всех этих индексов имеют одинаковые значения i (при этом $\sum N_i = N$). При интегрировании квадрата $|\psi|^2$ по $d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_N$ обращаются в нуль все члены, за исключением только квадратов модулей каждого из членов суммы¹⁾; поскольку общее число членов в сумме (45,3) равно, очевидно,

$$\frac{N!}{N_1! N_2! \dots},$$

то отсюда и получается нормировочный коэффициент в (45,3).

¹⁾ Под интегрированием по $d\xi$ условно подразумевается (здесь и в §§ 46, 47) интегрирование по координатам вместе с суммированием по σ .

Для системы фермионов волновая функция ψ есть антисимметричная комбинация произведений (45,1). Так, для системы из двух частиц имеем

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) - \psi_{p_1}(\xi_2) \psi_{p_2}(\xi_1)]. \quad (45,4)$$

В общем же случае N частиц волновая функция системы записывается в виде определителя

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{vmatrix}. \quad (45,5)$$

Перестановке двух частиц соответствует здесь перестановка двух столбцов определителя, в результате чего последний меняет знак.

Из выражения (45,5) следует важный результат. Если среди номеров $p_1, p_2, \dots$ есть два одинаковых, то две строки определителя окажутся одинаковыми и весь определитель обратится тождественно в нуль. Он будет отличным от нуля только в тех случаях, когда все номера $p_1, p_2, \dots$ различны. Таким образом, в системе одинаковых фермионов не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии две (или более) частицы. Это — так называемый *принцип Паули*; он был установлен *Вольфгангом Паули* в 1925 г.

§ 46. Обменное взаимодействие

Тот факт, что в уравнении Шредингера не учитывается наличие у частиц спина, отнюдь не обесценивает это уравнение и все получающиеся с его помощью результаты. Дело в том, что электрическое взаимодействие частиц не зависит от их спинов ¹⁾. Математически это означает, что гамильтониан системы электрически взаимодействующих частиц (в отсутствие магнитного поля) не содержит операторов спина, и потому при применении его к волновой функции никак не воздействует на спиновые переменные.

¹⁾ Это справедливо лишь постольку, поскольку речь идет о нерелятивистском приближении. При учете релятивистских эффектов взаимодействие заряженных частиц оказывается зависящим от спина.

Поэтому уравнению Шредингера удовлетворяет в действительности каждая из компонент волновой функции; другими словами, волновая функция системы частиц может быть написана в виде произведения

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots) = \chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots) \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots), \quad (46,1)$$

где функция φ зависит только от координат частиц, а функция χ — только от их спинов; о первой мы будем говорить как о *координатной* или *орбитальной*, а о второй — как о *спиновой* волновой функции. Уравнение Шредингера определяет по существу только координатную функцию φ , оставляя функцию χ произвольной. Во всех случаях, когда сам спин частиц нас не интересует, можно, следовательно, применять уравнение Шредингера, рассматривая в качестве волновой функции одну только координатную функцию, что и делалось в предыдущем изложении.

Однако несмотря на указанную независимость электрического взаимодействия частиц от их спина, существует своеобразная зависимость энергии системы от ее полного спина, проистекающая в конечном итоге из принципа неразличимости одинаковых частиц.

Рассмотрим систему, состоящую всего из двух одинаковых частиц. В результате решения уравнения Шредингера мы найдем ряд уровней энергии, каждому из которых соответствует определенная симметричная или антисимметричная координатная волновая функция $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Действительно, в силу одинаковости частиц гамильтониан (а с ним и уравнение Шредингера) системы инвариантен по отношению к их перестановке. Если уровни энергии не вырождены, то при перестановке координат $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ функция $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ может измениться только на постоянный множитель; производя же перестановку еще раз, убедимся, что этот множитель может быть равен только ± 1 ¹⁾.

Предположим сначала, что частицы имеют спин нуль. Спиновый множитель для таких частиц вообще отсутствует, и волновая функция сводится к одной лишь координатной функции $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, которая должна быть симметричной (поскольку частицы со спином нуль подчиняются статистике Бозе). Таким образом, не все из уровней энергии, получаю-

¹⁾ При наличии же вырождения можно всегда выбрать такие линейные комбинации функций, относящихся к данному уровню, которые тоже удовлетворяют этому условию.

щихся при формальном решении уравнения Шредингера, могут в действительности осуществляться; те из них, которые соответствуют антисимметричным функциям ψ , для рассматриваемой системы невозможны.

Перестановка двух одинаковых частиц эквивалентна операции инверсии системы координат (начало которой выбрано посредине прямой, соединяющей обе частицы). С другой стороны, в результате инверсии волновая функция ψ должна умножиться на $(-1)^l$, где l — орбитальный момент относительного движения обеих частиц (см. § 19). Сопоставляя эти соображения со сказанным выше, мы приходим к выводу, что система из двух одинаковых частиц со спином нуль может обладать только четным орбитальным моментом.

Далее, пусть система состоит из двух частиц со спином $\frac{1}{2}$ (скажем, электронов). Тогда полная волновая функция системы (т. е. произведение функции $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и спиновой функции $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$) должна быть непременно антисимметричной по отношению к перестановке обеих частиц. Поэтому при симметричной координатной функции спинорная функция должна быть антисимметричной, и наоборот. Будем писать спинорную функцию в спинорном виде, т. е. в виде спинора второго ранга $\chi^{\alpha\beta}$, каждый из индексов которого соответствует спину одного из электронов. Симметричной по спинам обеих частиц функции соответствует симметричный спинор ($\chi^{\alpha\beta} = \chi^{\beta\alpha}$), а антисимметричной — антисимметричный спинор ($\chi^{\alpha\beta} = -\chi^{\beta\alpha}$). Но мы знаем, что симметричный спинор второго ранга описывает систему с равным единице полным спином, а антисимметричный спинор сводится к скаляру, что соответствует равному нулю спину.

Таким образом, мы приходим к следующему результату. Те уровни энергии, которым соответствуют симметричные решения $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ уравнения Шредингера, могут фактически осуществляться при равном нулю полном спине системы, т. е. когда спины обоих электронов «антипараллельны», давая в сумме нуль. Значения же энергии, связанные с антисимметричными функциями $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, требуют равного единице полного спина, т. е. спины обоих электронов должны быть «параллельными».

Другими словами, возможные значения энергии системы электронов оказываются зависящими от ее полного спина. На этом основании можно говорить о некотором своеобраз-

ном взаимодействии частиц, приводящем к этой зависимости. Это взаимодействие называют *обменным*. Оно представляет собой чисто квантовый эффект, полностью исчезающий (как и сам спин) при предельном переходе к классической механике.

§ 47. Вторичное квантование. Случай статистики Бозе

В теории систем, состоящих из большого числа одинаковых частиц, широко применяется особый метод рассмотрения, известный под названием *вторичного квантования*. Этот метод в особенности необходим в релятивистской теории, где приходится иметь дело с системами, в которых само число частиц является переменным ¹⁾.

Пусть $\psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \dots$ — некоторая полная система ортогональных и нормированных волновых функций стационарных состояний одной частицы. В качестве таковых обычно выбирают плоские волны — волновые функции свободной частицы с определенными значениями импульса (и проекции спина); при этом, с целью сведения спектра состояний к дискретному, рассматривают движение частиц в большой, но ограниченной области пространства Ω (как это было объяснено в конце § 27).

В системе свободных частиц импульсы частиц сохраняются по отдельности. Тем самым сохраняются и *числа заполнения состояний* — числа $N_1, N_2, \dots$, указывающие, сколько частиц находится в каждом из состояний $\psi_1, \psi_2, \dots$. В системе взаимодействующих частиц импульсы каждой из них уже не сохраняются, а потому не сохраняются и числа заполнения. Для такой системы можно говорить лишь о распределении вероятностей различных значений чисел заполнения. Поставим себе целью построить математический аппарат, в котором именно числа заполнения (а не координаты и проекции спинов частиц) играли бы роль независимых переменных.

В таком аппарате состояние системы описывается, как говорят, «волновой функцией в пространстве чисел заполнения», которую мы обозначим как $\Phi(N_1, N_2, \dots; t)$ (с целью подчеркнуть ее отличие от обычной координатно-

¹⁾ Метод вторичного квантования был развит Дираком для фотонов, в применении к теории излучения (1927) и затем распространен на фермионы Вигнером и Йорданом (1928).

спиновой волновой функции $\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N; t)$. Квадрат модуля $|\Phi|^2$ определяет вероятность различных значений чисел $N_1, N_2, \dots$.

Соответственно такому выбору независимых переменных, также и операторы различных физических величин (в том числе гамильтониан системы) должны формулироваться в терминах их воздействия на функции чисел заполнения. К такой формулировке можно прийти, отправляясь от обычного матричного представления операторов. При этом надо рассмотреть матричные элементы операторов по отношению к волновым функциям стационарных состояний системы невзаимодействующих частиц. Поскольку эти состояния можно описывать заданием определенных значений чисел заполнения, то тем самым выяснится характер воздействия операторов на эти переменные.

Рассмотрим сначала системы из частиц, подчиняющихся статистике Бозе.

Пусть $\hat{f}_a^{(1)}$ есть оператор какой-либо величины, относящейся к одной (a -й) частице, т. е. действующий только на функции переменных ξ_a . Введем симметричный по всем частицам оператор

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_a \hat{f}_a^{(1)} \quad (47,1)$$

(суммирование по всем частицам) и определим его матричные элементы по отношению к волновым функциям (45,3). Прежде всего легко сообразить, что матричные элементы будут отличны от нуля только для переходов без изменения чисел $N_1, N_2, \dots$ (диагональные элементы) и для переходов, при которых одно из этих чисел увеличивается, а другое уменьшается на единицу. Действительно, поскольку каждый из операторов $\hat{f}_a^{(1)}$ действует только на одну функцию в произведении $\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2) \dots \psi_{p_N}(\xi_N)$, то его матричные элементы могут быть отличны от нуля только для переходов с изменением состояния одной частицы; но это означает, что число частиц, находящихся в одном состоянии, уменьшается, а в другом, соответственно, увеличивается на единицу. Вычисление этих матричных элементов по существу очень просто; его легче произвести самому, чем проследить за его изложением. Поэтому мы приведем только результат вычисления. Недиagonalные

элементы равны

$$\langle N_i, N_k - 1 | F^{(1)} | N_i - 1, N_k \rangle = f_{ik}^{(1)} \sqrt{N_i N_k}. \quad (47,2)$$

Мы указываем только те индексы, по которым матричный элемент недиагонален, опуская для краткости остальные. Здесь $f_{ik}^{(1)}$ — матричный элемент:

$$f_{ik}^{(1)} = \int \psi_i^*(\xi) \hat{f}^{(1)} \psi_k(\xi) d\xi; \quad (47,3)$$

поскольку операторы $\hat{f}_a^{(1)}$ отличаются только обозначением переменных, на которые они действуют, то интегралы (47,3) от индекса a не зависят и этот индекс опущен. Диагональные матричные элементы от $F^{(1)}$ представляют собой средние значения величины $F^{(1)}$ в состояниях $\psi_{N_1, N_2, \dots}$. Вычисление дает

$$\overline{F^{(1)}} = \sum_i f_{ii}^{(1)} N_i. \quad (47,4)$$

Введем теперь основные в методе вторичного квантования операторы $\hat{a}_i$, действующие уже не на функции координат, а на функции чисел заполнения. По определению, оператор $\hat{a}_i$, действуя на функцию $\Phi(N_1, N_2, \dots)$, уменьшает на единицу значение переменной N_i , одновременно умножая функцию на $\sqrt{N_i}$:

$$\hat{a}_i \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i, \dots) = \sqrt{N_i} \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots). \quad (47,5)$$

Можно сказать, что оператор $\hat{a}_i$ уменьшает на единицу число частиц, находящихся в i -м состоянии; его называют поэтому *оператором уничтожения* частиц. Его можно представить в виде матрицы, единственный отличный от нуля элемент которой есть

$$\langle N_i - 1 | a_i | N_i \rangle = \sqrt{N_i}. \quad (47,6)$$

Сопряженный с $\hat{a}_i$ оператор $\hat{a}_i^+$ изображается по определению (см. (11,9)) матрицей с единственным элементом:

$$\langle N_i | a_i^+ | N_i - 1 \rangle = \langle N_i - 1 | a_i | N_i \rangle^* = \sqrt{N_i}. \quad (47,7)$$

Это значит, что при воздействии на функцию $\Phi(N_1, N_2, \dots)$

он увеличивает число N_i на 1:

$$\hat{a}_i^+ \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i, \dots) = \\ = \sqrt{N_i + 1} \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i + 1, \dots). \quad (47,8)$$

Другими словами, оператор $\hat{a}_i^+$ увеличивает на 1 число частиц в i -м состоянии; его называют поэтому *оператором рождения* частиц.

Произведение операторов $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ при воздействии на волновую функцию может лишь умножить ее на постоянную, оставляя все переменные $N_1, N_2, \dots$ неизменными: оператор $\hat{a}_i$ уменьшает переменную N_i на 1, после чего $\hat{a}_i^+$ возвращает ее к исходному значению. Непосредственное перемножение матриц (47,6) и (47,7) действительно показывает, что $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ изображается диагональной матрицей с диагональными элементами, равными N_i . Можно написать, что

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i = N_i. \quad (47,9)$$

Аналогичным образом найдем

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ = N_i + 1. \quad (47,10)$$

Разность этих выражений дает правило коммутации между операторами $\hat{a}_i$ и $\hat{a}_i^+$:

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = 1. \quad (47,11)$$

Операторы же с различными индексами i и k , действующие на различные переменные (N_i и N_k), коммутативны:

$$\hat{a}_i \hat{a}_k - \hat{a}_k \hat{a}_i = 0, \quad \hat{a}_i \hat{a}_k^+ - \hat{a}_k^+ \hat{a}_i = 0 \quad (i \neq k). \quad (47,12)$$

Исходя из описанных свойств операторов $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$, легко видеть, что оператор

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_{i,k} f_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k \quad (47,13)$$

совпадает с оператором (47,1). Действительно, все его матричные элементы, которые можно вычислить с помощью (47,6—7), совпадают с элементами (47,2). Этот результат очень важен. В формуле (47,13) величины $f_{ik}^{(1)}$ — просто числа. Таким образом, нам удалось выразить обычный оператор, действующий на функции координат, в виде

оператора, действующего на функции новых переменных — чисел заполнения N_i .

Полученный результат легко обобщается и на операторы другого вида. Пусть

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{a > b} \hat{f}_{ab}^{(2)}, \quad (47,14)$$

где $\hat{f}_{ab}^{(2)}$ — оператор физической величины, относящийся сразу к паре частиц и поэтому действующий на функции от ξ_a и ξ_b . Аналогичные вычисления покажут, что такой оператор может быть выражен через операторы $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ посредством

$$\hat{F}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i, k, l, m} (f^{(2)})_{lm}^{ik} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_m \hat{a}_l, \quad (47,15)$$

где

$$(f^{(2)})_{lm}^{ik} = \iint \psi_l^*(\xi_1) \psi_k^*(\xi_2) \hat{f}^{(2)} \psi_l(\xi_1) \psi_m(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2.$$

Таким же образом формулы обобщаются и на симметричные по всем частицам операторы любого другого вида.

С помощью этих формул можно выразить через операторы $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ также и гамильтониан фактически исследуемой физической системы из N взаимодействующих одинаковых частиц. Гамильтониан такой системы, разумеется, симметричен по всем частицам. Так, если взаимодействие в системе сводится к взаимодействию каждой пары частиц, то гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \sum_a \hat{H}_a^{(1)} + \sum_{a > b} U^{(2)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b). \quad (47,16)$$

Здесь $\hat{H}_a^{(1)}$ есть часть гамильтониана, зависящая от координат только одной частицы, т. е. гамильтониан свободной частицы:

$$\hat{H}_a^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_a. \quad (47,17)$$

Функция же $U^{(2)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ — энергия взаимодействия двух частиц. Применив к (47,16) формулы (47,13) и (47,15), получим

$$\hat{H} = \sum_{i, k} H_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{i, k, l, m} (U^{(2)})_{lm}^{ik} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_m \hat{a}_l. \quad (47,18)$$

Этим осуществляется искомое представление гамильтониана в виде оператора, действующего на функции чисел заполнения.

Для системы невзаимодействующих частиц в выражении (47,18) остается только первый член:

$$\hat{H} = \sum_{i, k} H_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k. \quad (47,19)$$

Если в качестве функций ψ_i выбраны (как было условлено) собственные функции гамильтониана $\hat{H}^{(1)}$ свободной частицы, то матрица $H_{ik}^{(1)}$ диагональна и ее диагональные элементы — собственные значения энергии частицы ε_i . Таким образом,

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i; \quad (47,20)$$

заменяя оператор $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ его собственными значениями (47,9), получим для уровней энергии системы выражение

$$E = \sum_i \varepsilon_i N_i \quad (47,21)$$

— тривиальный результат, который и должен был получиться.

Формулы аппарата вторичного квантования можно представить в более компактном виде, введя так называемые ψ -операторы:

$$\hat{\psi}(\xi) = \sum_i \psi_i(\xi) \hat{a}_i, \quad \hat{\psi}^+(\xi) = \sum_i \psi_i^*(\xi) \hat{a}_i^+, \quad (47,22)$$

где переменные ξ рассматриваются как параметры. В силу сказанного выше об операторах $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ ясно, что оператор $\hat{\psi}$ уменьшает, а $\hat{\psi}^+$ увеличивает полное число частиц в системе на единицу¹⁾.

С помощью ψ -операторов гамильтониан (47,18) напишется в виде

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^+(\xi) \hat{H}^{(1)} \hat{\psi}(\xi) d\xi + \\ + \frac{1}{2} \iint \hat{\psi}^+(\xi) \hat{\psi}^+(\xi') U^{(2)} \hat{\psi}(\xi') \hat{\psi}(\xi) d\xi d\xi'. \quad (47,23)$$

¹⁾ Обратим внимание на аналогию между выражениями (47,22) и разложением $\psi = \sum_i a_i \psi_i$ произвольной волновой функции по некоторой полной системе функций. Здесь оно как бы снова квантуется. С этим связано название излагаемого метода вторичным квантованием.

В этом легко убедиться прямой подстановкой ψ -операторов (47,22).

Оператор $\hat{\psi}^+\hat{\psi}$, построенный из ψ -операторов подобно произведению $\psi^*\psi$, определяющему плотность вероятности для частицы в состоянии с волновой функцией ψ , называют оператором плотности частиц. Интеграл же

$$\hat{N} = \int \hat{\psi}^+\hat{\psi} d\xi \quad (47,24)$$

играет в аппарате вторичного квантования роль оператора полного числа частиц в системе. Действительно, подставив в него ψ -операторы в виде (47,22) и приняв во внимание нормированность и взаимную ортогональность волновых функций ψ_i , получим

$$\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i. \quad (47,25)$$

Каждый член этой суммы есть оператор числа частиц в i -м состоянии — согласно (47,9) его собственные значения равны числам заполнения N_i ; сумма же всех этих чисел есть полное число частиц в системе. Для систем с заданным числом частиц эти утверждения (как и свойства гамильтониана системы свободных частиц (47,19)) представляются тривиальными. Мы увидим, однако, что их обобщение в релятивистской теории приводит к новым, отнюдь не тривиальным результатам.

§ 48. Вторичное квантование. Случай статистики Ферми

Вся принципиальная сторона метода вторичного квантования остается без изменения для систем, состоящих из одинаковых фермионов. Конкретные же формулы для матричных элементов величин и для операторов $\hat{a}_i$, конечно, меняются.

Мы не станем приводить здесь деталей соответствующих вычислений и подчеркнем лишь содержащиеся в них существенные моменты, отличающиеся от вычислений в предыдущем параграфе.

Волновая функция $\psi_{N_1, N_2, \dots}$ имеет теперь вид (45,5). Как уже было указано, среди чисел $p_1, p_2, \dots$, нумерующих занятые состояния, не может быть одинаковых, так как в противном случае определитель обратится в нуль.

Другими словами, числа заполнения N_i могут иметь только значения 0 и 1.

В связи с антисимметричностью функции (45,5) возникает прежде всего вопрос о выборе ее знака. В случае статистики Бозе этого вопроса не было, так как ввиду симметричности волновой функции раз выбранный ее знак сохранялся при всех перестановках частиц. Для того чтобы сделать знак функции (45,5) определенным, можно условиться устанавливать его следующим образом. Перенумеруем все состояния ψ_i раз и навсегда последовательными номерами. После этого будем заполнять строки определителя (45,5) всегда таким образом, чтобы было $p_1 < p_2 < p_3 < \dots < p_N$, причем в столбцах стоят функции различных переменных в последовательности $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$. Знак волновой функции будет, таким образом, зависеть от всей совокупности номеров $p_1, p_2, \dots$, т. е. от всех чисел заполнения.

В результате окажутся зависящими от них также и знаки матричных элементов операторов уничтожения и рождения частиц. Именно, оказывается, что эти операторы должны быть определены как матрицы с единственным отличным от нуля элементом, равным

$$\langle 0_i | a_i | 1_i \rangle = \langle 1_i | a_i^+ | 0_i \rangle = (-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} N_k}. \quad (48,1)$$

Перемножением матриц можно убедиться в том, что произведения $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ и $\hat{a}_i \hat{a}_i^+$ диагональны, причем

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i = N_i, \quad \hat{a}_i \hat{a}_i^+ = 1 - N_i, \quad (48,2)$$

а их сумма

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ + \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = 1. \quad (48,3)$$

Обратим внимание на то, что обращение в нуль произведения $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ при $N_i = 0$ и произведения $\hat{a}_i \hat{a}_i^+$ при $N_i = 1$ вполне естественно. В этих произведениях первым действует оператор, расположенный справа; но нельзя уничтожить частицу в i -м состоянии, если ее там нет ($N_i = 0$), а согласно принципу Паули нельзя родить электрон в i -м состоянии, если это состояние уже занято, т. е. если $N_i = 1$. По такой же причине заранее очевидно, что

$$\hat{a}_i \hat{a}_i = 0, \quad \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ = 0. \quad (48,4)$$

Для всех же пар операторов с различными i и k получается

$$\begin{aligned}\hat{a}_i \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_i &= 0, & \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i^+ &= 0, \\ \hat{a}_i \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i &= 0 & (i \neq k),\end{aligned}\quad (48,5)$$

т. е. все они, как говорят, *антикоммутируют* — произведение меняет знак при перестановке множителей. Это отличие от случая статистики Бозе вполне естественно. В последнем случае операторы $\hat{a}_i$ и $\hat{a}_k$ были совершенно независимыми; каждый из операторов $\hat{a}_i$ действовал только на одну переменную N_i , причем результат воздействия не зависел от значений остальных чисел заполнения. В случае же статистики Ферми результат воздействия оператора $\hat{a}_i$ зависит не только от самого числа N_i , но и от чисел заполнения всех предыдущих состояний. Поэтому действие различных операторов $\hat{a}_i$, $\hat{a}_k$ не может рассматриваться как независимое.

После того как свойства операторов $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ таким образом установлены, все остальные формулы (47,13—25) остаются полностью в силе.

Глава VII

АТОМ

§ 49. Атомные уровни энергии

В нерелятивистском приближении стационарные состояния атома определяются уравнением Шредингера для системы электронов, движущихся в кулоновом поле ядра и электрически взаимодействующих друг с другом. Как мы знаем, для системы частиц в центрально-симметричном внешнем поле сохраняется полный орбитальный момент L , а также четность состояния. Поэтому каждое стационарное состояние атома будет характеризоваться определенным значением момента L и своей четностью. Кроме того, благодаря описанному в § 46 эффекту обменного взаимодействия каждое стационарное состояние атома будет характеризоваться также и определенным значением полного спина электронов S .

Таким образом, в нерелятивистском приближении уровни энергии атома классифицируются по значениям L , S и четности (разумеется, что обратное при этом не имеет места: значения этих квантовых чисел сами по себе еще не определяют однозначным образом энергию состояния). Каждый такой уровень энергии вырожден соответственно различным возможным направлениям векторов L и S в пространстве. Кратности вырождения по этим направлениям равны соответственно $2L+1$ и $2S+1$. Всего, следовательно, кратность вырождения уровня с заданными L и S равна произведению $(2L+1)(2S+1)$.

В действительности, однако, в электромагнитном взаимодействии электронов существуют релятивистские эффекты, зависящие от их спинов (они будут рассмотрены более подробно в § 51). Эти эффекты приводят к тому, что энергия атома оказывается зависящей не только от вели-

чин векторов $\mathbf{L}$ и $\mathbf{S}$, но и от их взаимного расположения. Строго говоря, при учете релятивистских взаимодействий орбитальный момент $\mathbf{L}$ и спин $\mathbf{S}$ атома уже не сохраняются каждый по отдельности. Остается лишь закон сохранения полного момента $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, являющийся универсальным точным законом, следующим из изотропии пространства по отношению к замкнутой системе. Поэтому точные уровни энергии атома должны характеризоваться значениями J полного момента.

Однако если релятивистские эффекты относительно малы (как это часто имеет место), то их можно учесть в качестве возмущения. Под влиянием этого возмущения вырожденный уровень с заданными L и S «расщепляется» на ряд различных (близких друг к другу) уровней, отличающихся значениями полного момента J . Эти уровни определяются (в первом приближении) соответствующим секулярным уравнением (§ 33), а их волновые функции (нулевого приближения) представляют собой определенные линейные комбинации волновых функций исходного вырожденного уровня с данными L и S . В этом приближении можно, следовательно, по-прежнему считать абсолютные величины орбитального момента и спина (но не их направления) сохраняющимися и характеризовать уровни также и значениями L и S .

Таким образом, в результате релятивистских эффектов уровень с данными значениями L и S расщепляется на ряд уровней с различными значениями J . Об этом расщеплении говорят как о *тонкой структуре* (или *мультиплетном расщеплении*) уровня. Как мы знаем, J пробегает значения от $L+S$ до $|L-S|$; поэтому уровень с данными L и S расщепляется на $2S+1$ (если $L > S$) или $2L+1$ (если $L < S$) различных уровней. Каждый из этих уровней остается вырожденным по направлениям вектора $\mathbf{J}$; кратность этого вырождения равна $2J+1$ ¹⁾.

Атомные уровни энергии (или как говорят, *спектральные термы* атомов) принято обозначать символами, аналогичными тем, которые используются для обозначения состояний отдельных частиц с определенными значениями момента (§ 29). Именно, состояния с различными значениями

¹⁾ Некоторыми специфическими особенностями обладает тонкая структура уровней энергии атома водорода (см. § 94).

полного орбитального момента L обозначаются большими буквами латинского алфавита со следующим соответствием:

$$\begin{array}{ccccccc} L = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \dots \\ & S & P & D & F & G & H \dots \end{array}$$

Слева сверху от этого символа указывается число $2S+1$, называемое *мультиплетностью* термина (надо, однако, помнить, что это число совпадает с числом компонент тонкой структуры уровня лишь при $L \geq S$)¹⁾. Справа внизу указывается значение полного момента J . Так, символы $^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$ обозначают уровни с $L=1$, $S=1/2$, $J=1/2$, $3/2$.

§ 50. Состояния электронов в атоме

Атом с более чем одним электроном представляет собой сложную систему взаимодействующих друг с другом электронов, движущихся в поле ядра. Для такой системы можно, строго говоря, рассматривать только состояния системы в целом. Тем не менее оказывается, что в атоме можно, с хорошей точностью, ввести понятие о состояниях каждого электрона в отдельности как о стационарных состояниях движения электрона в некотором эффективном центрально-симметричном поле, созданном ядром вместе со всеми остальными электронами. Для различных электронов в атоме эти поля, вообще говоря, различны, причем определяться они должны одновременно все, поскольку каждое из них зависит от состояний всех остальных электронов. Такое поле называется *самосогласованным*.

Поскольку самосогласованное поле центрально-симметрично, то каждое состояние электрона характеризуется определенным значением его орбитального момента l . Состояния отдельного электрона при заданном l нумеруются (в порядке возрастания их энергии) с помощью *главного квантового числа* n , пробегающего значения $n=l+1, l+2, \dots$; такой выбор порядка нумерации устанавливают в соответствии с тем, который принят для атома водорода. Но последовательность возрастания уровней энергии с различными l в сложных атомах, вообще говоря, отличается от имеющей место у атома водорода. В последнем энергия

¹⁾ При $2S+1=1, 2, 3, \dots$ говорят соответственно о синглетном, дублетном, триплетном, ... уровнях.

вообще не зависит от l , так что состояния с большими n всегда обладают большей энергией. В сложных же атомах уровень, например, с $n=5$, $l=0$ оказывается лежащим ниже уровня с $n=4$, $l=2$ (см. об этом подробнее в § 52).

Состояния отдельных электронов с различными n и l принято обозначать символом, состоящим из цифры, указывающей значение главного квантового числа, и буквы, указывающей значение l ¹⁾. Так, $4d$ обозначает состояние с $n=4$, $l=2$. Полное описание состояния атома требует наряду с указанием значений полных L , S , J также и перечисления состояний всех электронов. Так, символ $1s2p^3P_0$ обозначает состояние атома гелия, в котором $L=S=1$, $J=0$, а два электрона находятся в состояниях $1s$ и $2p$. Если несколько электронов находится в состояниях с одинаковыми l и n , то это принято обозначать для краткости в виде показателей степени; так, $3p^2$ обозначает два электрона в состояниях $3p$. О распределении электронов в атоме по состояниям с различными l , n говорят как об *электронной конфигурации*.

При заданных значениях n и l электрон может обладать различными значениями проекций орбитального момента (m) и спина (σ). При заданном l число m пробегает $2l+1$ значений; число же σ ограничено всего двумя значениями $\pm \frac{1}{2}$. Поэтому всего имеется $2(2l+1)$ различных состояний с одинаковыми n , l ; такие состояния называют *эквивалентными*. В каждом из них может находиться, согласно принципу Паули, по одному электрону. Таким образом, в атоме может одновременно иметь одинаковые n , l не более $2(2l+1)$ электронов. О совокупности электронов, заполняющих все состояния с данными n , l говорят как о *замкнутой оболочке* данного типа.

Различие в энергии атомных уровней, обладающих различными L , S при одинаковой электронной конфигурации, связано с электростатическим взаимодействием электронов (от тонкой структуры каждого мультиплетного уровня мы здесь отвлекаемся). Обычно разности этих энергий сравнительно малы — в несколько раз меньше расстояний между уровнями с различными конфигурациями. По поводу взаимного расположения уровней с одинаковой конфигурацией,

¹⁾ Употребительна также терминология, согласно которой об электронах с главными квантовыми числами $n=1, 2, 3, \dots$ говорят как об электронах соответственно K -, L -, M -... оболочек.

но различными L , S существует следующее эмпирическое правило (*правило Хунда*):

Наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным при данной электронной конфигурации значением S и наибольшим (возможным при этом S) значением L .

Покажем, каким образом можно найти возможные для данной электронной конфигурации атомные термы. Если электроны не эквивалентны, то определение возможных значений L , S производится непосредственно по правилу сложения моментов. Так, для конфигурации np , $n'p$ (с различными n , n') суммарный момент L может иметь значения 2, 1, 0, а суммарный спин $S=0, 1$; комбинируя их друг с другом, получим термы 1^3S , 1^3P , 1^3D .

Для конфигураций же из эквивалентных электронов число возможных термов существенно сокращается в виду ограничений, налагаемых принципом Паули. Рассмотрим, например, конфигурацию np^2 . При $l=1$ (p -состояние) проекция m орбитального момента электрона может иметь значения $m=1, 0, -1$, так что возможны шесть состояний со следующими парами чисел m , σ :

$$\begin{array}{lll} a) 1, \quad 1/2, & b) 0, \quad 1/2, & c) -1, 1/2, \\ a') 1, -1/2, & b') 0, -1/2, & c') -1, -1/2. \end{array}$$

Два электрона можно расположить по одному в любых двух из этих состояний. В результате получим состояния атома со следующими значениями проекций $M_L=\sum m$, $M_S=\sum \sigma$ полного орбитального момента и спина:

$$\begin{array}{lll} a+a') 2, 0, & a+b) 1, 1, & a+c) 0, 1, \\ a+b') 1, 0, & a+c') 0, 0, & \\ a'+b) 1, 0, & a'+c) 0, 0, & \\ & b+b') 0, 0 & \end{array}$$

(состояний с отрицательными значениями M_L , M_S можно не выписывать, так как они не дают ничего нового). Наличие состояния с $M_L=2$, $M_S=0$ показывает, что должен иметься терм $1D$; этому терму должны соответствовать еще и по одному состоянию $(1, 0)$, $(0, 0)$. Далее, остается состояние с $(1, 1)$, так что должен иметься терм $3P$; ему отвечают еще и состояния $(0, 1)$, $(1, 0)$, $(0, 0)$. После этого остается еще одно состояние $(0, 0)$, которое соответствует терму $1S$. Таким образом, для конфигурации из двух эквивалентных

p -электронов возможно лишь по одному терму типов 1S , 3P , 1D .

Для конфигурации из максимального числа эквивалентных электронов (т. е. для замкнутой оболочки) всегда возможно лишь состояние 1S , так как моменты электронов в такой оболочке взаимно компенсируются. Отметим также, что конфигурациям, из которых одна имеет столько электронов, сколько не хватает другой для полного заполнения оболочки, отвечают термы одинакового типа (так, конфигурация np^4 имеет термы тех же типов, что и найденные выше для конфигурации np^2). Это является очевидным результатом того, что отсутствие электрона в оболочке можно рассматривать как *дырку*, состояние которой определяется теми же квантовыми числами, что и состояние отсутствующего электрона.

§ 51. Тонкая структура атомных уровней

Как уже указывалось, зависимость гамильтониана атома от операторов спина электронов появляется только при учете релятивистских эффектов, т. е. эффектов, исчезающих в предельном переходе к $c \rightarrow \infty$. К вопросу о происхождении релятивистских членов в гамильтониане мы вернемся в § 94, а пока опишем общий вид этих членов результативным образом.

Оказывается, что релятивистские члены в гамильтониане атома распадаются на две категории — одни из них линейны относительно операторов спина электрона, а другие квадратичны по ним. Первые соответствуют как бы взаимодействию собственных магнитных моментов электронов с магнитными моментами орбитального движения; его называют *спин-орбитальным взаимодействием*. Вторые же отвечают взаимодействию магнитных моментов электронов друг с другом (*взаимодействие спин—спин*); оба вида взаимодействий одинакового (второго) порядка по v/c — отношению скорости электронов к скорости света. Фактически, однако, в тяжелых атомах спин-орбитальное взаимодействие значительно превышает взаимодействие спин—спин. Это связано с тем, что спин-орбитальное взаимодействие быстро растет с увеличением атомного номера, между тем как спин-спиновое в основном вообще не зависит от Z . Последнее очевидно уже из самой природы спин-спинового взаимодействия

как непосредственного взаимодействия электронов друг с другом, не имеющего отношения к полю ядра.

Оператор взаимодействия спин—орбита имеет вид

$$\hat{V}_{sl} = \sum_a \alpha_a \hat{\mathbf{l}}_a \hat{\mathbf{s}}_a \quad (51,1)$$

(суммирование по всем электронам в атоме), где $\hat{\mathbf{s}}_a$ и $\hat{\mathbf{l}}_a$ — операторы спина и орбитального момента электронов, а α_a — функции их координат.

Вычисление энергии тонкой структуры атомных уровней состоит в усреднении оператора возмущения $\hat{V}_{sl}$ по невозмущенным состояниям электронной оболочки. Такое усреднение производится в два этапа. Прежде всего усредняем по электронному состоянию атома с заданными величинами L и S полных орбитального момента и спина атома, но не их направлениями. После такого усреднения $\hat{V}_{sl}$ остается еще оператором, который, однако, должен уже выражаться лишь через операторы величин, характеризующих атом в целом (а не отдельные электроны в нем). Таковыми являются операторы $\hat{\mathbf{S}}$ и $\hat{\mathbf{L}}$ ¹⁾.

Обозначим оператор усредненного таким образом спин-орбитального взаимодействия через $\hat{V}_{LS}$. Будучи линейен по $\hat{\mathbf{S}}$, он имеет вид

$$\hat{V}_{LS} = A \hat{\mathbf{L}} \hat{\mathbf{S}}, \quad (51,2)$$

где A — постоянная, характерная для данного (нерасщепленного) терма, т. е. зависящая от S и L , но не от полного момента J атома.

¹⁾ Для лучшего уяснения смысла описанной операции напомним, что усреднение означает вообще в квантовой механике взятие соответствующего диагонального матричного элемента. Частичное же усреднение состоит в составлении матричных элементов, диагональных лишь по некоторым из всех квантовых чисел, определяющих состояние системы. Так, в данном случае усреднение оператора (51,1) означает составление матрицы из элементов $\langle n M'_L M'_S | V_{sl} | n M_L M_S \rangle$ со всеми возможными M_L , M'_L и M_S , M'_S и диагональных по всем остальным квантовым числам (совокупность которых обозначена через n). Соответственно, и операторы $\hat{\mathbf{S}}$ и $\hat{\mathbf{L}}$ надо понимать как матрицы $\langle M'_S | \hat{\mathbf{S}} | M_S \rangle$ и $\langle M'_L | \hat{\mathbf{L}} | M_L \rangle$, элементы которых даются формулами (15, 11). Подобным приемом поэтапного усреднения нам придется еще неоднократно пользоваться в дальнейшем.

Для вычисления энергии расщепления надо теперь решить секулярное уравнение, составленное из матричных элементов операторов (51,2). В данном случае, однако, мы заранее знаем правильные функции нулевого приближения, в которых матрица V_{LS} диагональна. Это — волновые функции состояний с определенными значениями полного момента J . Усреднение по такому состоянию означает замену оператора $\hat{S}\hat{L}$ его собственным значением, равным, согласно (17,3),

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

Поскольку у всех компонент мультиплета значения L и S одинаковы, а мы интересуемся лишь их относительным расположением, то можно написать энергию расщепления в виде

$$\frac{1}{2} AJ(J+1). \quad (51,3)$$

Интервалы между соседними компонентами (характеризуемыми числами J и $J-1$) равны, следовательно,

$$\Delta E_{J, J-1} = AJ. \quad (51,4)$$

Эта формула выражает так называемое *правило интервалов Ланде*.

Постоянная A может быть как положительной, так и отрицательной. При $A > 0$ наиболее низкой из компонент мультиплетного уровня является уровень с наименьшим возможным J , т. е. $J = |L - S|$; такие мультиплеты называют *нормальными*. Если же $A < 0$, то наиболее низким является уровень с $J = L + S$ (*обращенный мультиплет*).

Для усредненного оператора взаимодействия спин—спин должно получиться, аналогично формуле (51,2), выражение, квадратичное по $\hat{S}$. Квадратичными по $\hat{S}$ выражениями являются $\hat{S}^2$ и $(\hat{S}\hat{L})^2$. Из них первое имеет собственные значения, не зависящие от J , и потому не приводит к расщеплению терма. Поэтому его можно опустить и написать

$$\hat{V}_{SS} = B(\hat{S}\hat{L})^2, \quad (51,5)$$

где B — постоянная. Собственные значения этого оператора содержат члены, не зависящие от J , члены, пропорциональ-

ные $J(J+1)$, и, наконец, член, пропорциональный $J^2(J+1)^2$. Из них первые не дают расщепления и потому не интересны, вторые же могут быть включены в выражение (51,3), что эквивалентно просто некоторому изменению постоянной A . Наконец, третьи дают в энергии терма выражение

$$\frac{B}{4} J^2 (J+1)^2. \quad (51,6)$$

Изложенная схема построения атомных уровней основана на представлении, что орбитальные моменты электронов складываются в полный орбитальный момент L атома, а их спины — в полный спин S . Как уже указывалось, такое рассмотрение возможно лишь при условии малости релятивистских эффектов; точнее, интервалы тонкой структуры должны быть малы по сравнению с разностями уровней с различными L , S . Такое приближение называют *рассель-саундеровским* случаем; говорят также об *LS-типе* связи.

Фактически, однако, область применимости этого приближения ограничена. По *LS-типу* построены уровни легких атомов, а по мере увеличения атомного номера релятивистские взаимодействия в атоме усиливаются, и рассель-саундеровское приближение становится неприменимым.

В противоположном предельном случае релятивистское взаимодействие велико по сравнению с электростатическим. В этом случае нельзя говорить об орбитальном моменте и спине в отдельности, поскольку они не сохраняются. Отдельные электроны характеризуются своими полными моментами j , складывающимися в общий полный момент атома J . О такой схеме построения атомных уровней говорят, как о *jj-типе* связи. Фактически в чистом виде этот тип связи не встречается; среди уровней очень тяжелых атомов наблюдаются различные промежуточные между *LS*- и *jj*-типами виды связи.

Дальнейшее (после тонкого) расщепление атомных уровней энергии возникает в результате взаимодействия магнитных моментов электрона и ядра — так называемое *сверхтонкое расщепление*. В виду малости магнитных моментов ядер (по сравнению с моментами электронов) это взаимодействие сравнительно очень мало, а потому и интервалы создаваемого им расщепления очень малы по сравнению с интервалами тонкой структуры. Сверхтонкая структура,

следовательно, должна рассматриваться для каждой из компонент тонкой структуры в отдельности.

Обозначим спин ядра посредством i (как это принято в атомной спектроскопии). Полный момент атома (вместе с ядром) $F = J + i$, где J обозначает, по-прежнему, полный момент электронной оболочки. Каждая компонента сверхтонкой структуры характеризуется определенным значением F . По общим правилам сложения моментов, квантовое число F принимает значения

$$F = J + i, \quad J + i - 1, \quad \dots, \quad |J - i|. \quad (51,7)$$

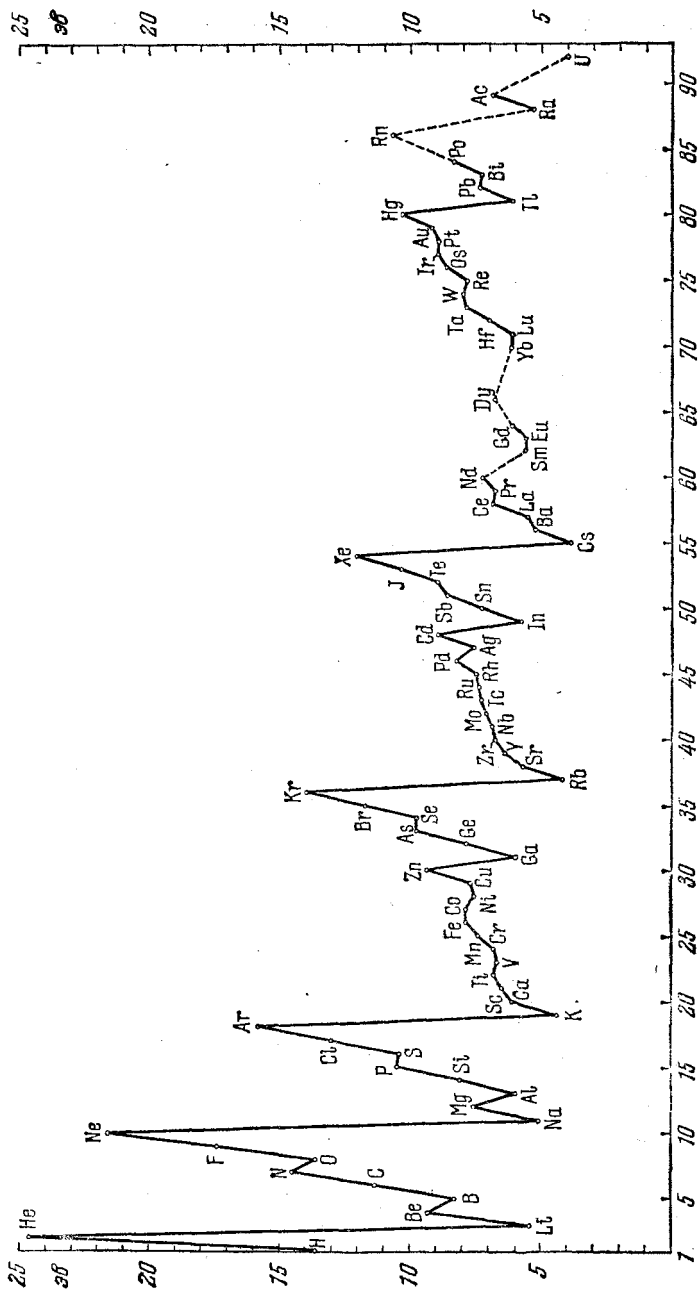
§ 52. Периодическая система элементов Менделеева

Выяснение природы установленной *Д. И. Менделеевым* периодичности изменения свойств, обнаруживаемой в ряду элементов, расположенных в порядке увеличения атомного номера, требует рассмотрения особенностей в последовательном заполнении электронной оболочки атомов; это было сделано *Н. Бором* (1922).

При переходе от одного атома к следующему увеличивается на единицу заряд и к оболочке добавляется один электрон. На первый взгляд, можно было бы ожидать, что энергии связи каждого из последовательно добавляемых электронов обнаружат монотонное изменение с увеличением атомного номера. В действительности, однако, это не так.

В нормальном состоянии атома водорода имеется всего один электрон в состоянии $1s$. В атоме следующего элемента — гелия — добавляется еще один электрон в том же состоянии $1s$. Энергия связи каждого из $1s$ -электронов в атоме гелия, однако, значительно больше, чем энергия связи электрона в атоме водорода. Это обстоятельство является естественным следствием различия между полем, в котором находится электрон в атоме H и полем, в которое попадает электрон, добавляемый к иону He^+ : на больших расстояниях эти поля примерно совпадают, но вблизи ядра с зарядом $Z=2$ поле иона He^+ сильнее, чем поле ядра атома водорода с $Z=1$.

В атоме лития ($Z=3$) третий электрон попадает в состояние $2s$, поскольку в состояниях $1s$ не может находиться одновременно более двух электронов. При заданном Z уровень $2s$ расположен выше уровня $1s$; по мере увеличения



[Рис. 11.]

заряда ядра тот и другой понижаются. Однако при переходе от $Z=2$ к $Z=3$ первый эффект значительно преобладает над вторым, и потому энергия связи третьего электрона в атоме Li значительно меньше энергии связи электронов в атоме гелия. Далее, в атомах от Be ($Z=4$) до Ne ($Z=10$) последовательно добавляются сначала еще один $2s$ -электрон, а затем шесть $2p$ -электронов. Энергии связи прибавляемых в этом ряду электронов, ввиду увеличения заряда ядра, в общем растут. Следующий же добавляемый при переходе к атому Na ($Z=11$) электрон попадает в состояние $3s$; эффект перехода в более высокую оболочку при этом преобладает над эффектом увеличения заряда ядра, и энергия связи снова сильно падает.

Такая картина заполнения электронных оболочек характерна для всей последовательности элементов. Все электронные состояния можно распределить по последовательно заполняющимся группам: по мере заполнения в ряду элементов каждой из них энергия связи в общем растет, но в момент начала заполнения состояний следующей группы энергия связи сильно падает.

На рис. 11 нанесены известные из спектроскопических данных ионизационные потенциалы элементов; они определяют энергии связи электронов, добавляемых при переходе от каждого элемента к следующему.

Различные состояния распределяются на последовательно заполняющиеся группы следующим образом:

1s	2 электрона	
2s, 2p	8 электронов	
3s, 3p	8	»
4s, 3d, 4p	18	»
5s, 4d, 5p	18	»
6s, 4f, 5d, 6p	32 электрона	
7s, 6d, 5f,...		

(52,1)

Первая группа заполняется в H и He; заполнение второй и третьей соответствует двум первым (малым) периодам периодической системы, содержащим по 8 элементов. Далее следуют два больших периода по 18 элементов и большой период, включающий редкоземельные элементы и содержащий всего 32 элемента. Последняя группа состояний не заполняется полностью в существующих в природе (и искусственных трансурановых) элементах.

Для понимания хода изменения свойств элементов при заполнении состояний каждой группы существенна следующая особенность d - и f -состояний, отличающая их от состояний s и p . Кривые эффективной потенциальной энергии центрально-симметричного поля (складывающегося из электрического поля и центробежного поля) для электрона в тяжелом атоме после быстрого, почти вертикального, спадания вблизи начала координат имеют глубокий минимум, вслед за чем начинают подниматься, асимптотически приближаясь к нулю. Для s - и p -состояний эти кривые идут в своей возрастающей части очень близко друг к другу. Это значит, что в этих состояниях электрон находится примерно на одинаковых расстояниях от ядра. Кривые же для d - и, в особенности, для f -состояний проходят значительно левее; ограничиваемая ими «классически доступная» область заканчивается значительно ближе, чем в s - и p -состояниях при той же полной энергии электронов. Другими словами, в d - и f -состояниях электрон находится в основном значительно ближе к ядру, чем в s - и p -состояниях.

Ряд свойств атомов (в том числе химические свойства элементов — см. § 58) зависит, главным образом, от внешних областей электронных оболочек. В этой связи весьма существенна описанная особенность d - и f -состояний. Так, при заполнении состояний $4f$ (у редкоземельных элементов — см. ниже) добавляемые электроны располагаются значительно ближе к ядру, чем электроны в ранее заполнившихся состояниях. В результате эти электроны почти не сказываются на химических свойствах, и все редкоземельные элементы оказываются химически очень сходными.

Элементы, содержащие заполненные d - и f -оболочки (или не содержащие их вовсе), называют элементами *главных групп*; элементы же, в которых как раз происходит заполнение этих состояний, называют элементами *промежуточных групп*. Элементы этих групп удобно рассматривать отдельно.

Начнем с элементов главных групп. Водород и гелий обладают нормальными состояниями:



(индекс слева у химического символа обозначает везде атомный номер). Электронные конфигурации остальных элементов главных групп представлены в табл. 1. В каждом атоме

Т а б л и ц а 1

Электронные конфигурации элементов главных групп

	s	s ²	s ² p	s ² p ²	s ² p ³	s ² p ⁴	s ² p ⁵	s ² p ⁶	
n = 2	³ Li	⁴ Be	⁵ B	⁶ C	⁷ N	⁸ O	⁹ F	¹⁰ Ne	1s ²
3	¹¹ Na	¹² Mg	¹³ Al	¹⁴ Si	¹⁵ P	¹⁶ S	¹⁷ Cl	¹⁸ Ar	2s ² 2p ⁶
4	¹⁹ K	²⁰ Ca							3s ² 3p ⁶
4	²⁹ Cu	³⁰ Zn	³¹ Ga	³² Ge	³³ As	³⁴ Se	³⁵ Br	³⁶ Kr	3d ¹⁰
5	³⁷ Rb	³⁸ Sr							4s ² 4p ⁶
5	⁴⁷ Ag	⁴⁸ Cd	⁴⁹ In	⁵⁰ Sn	⁵¹ Sb	⁵² Te	⁵³ I	⁵⁴ Xe	4d ¹⁰
6	⁵⁵ Cs	⁵⁶ Ba							5s ² 5p ⁶
6	⁷⁹ Au	⁸⁰ Hg	⁸¹ Tl	⁸² Pb	⁸³ Bi	⁸⁴ Po	⁸⁵ At	⁸⁶ Rn	4f ¹⁴ 5d ¹⁰
7	⁸⁷ Fr	⁸⁸ Ra							6s ² 6p ⁶
	² S _{1/2}	¹ S ₀	² P _{1/2}	³ P ₀	⁴ S _{3/2}	³ P ₂	² P _{3/2}	¹ S ₀	

полностью заполнены оболочки, указанные справа от таблицы в той же и во всех более высоких строках. Электронная конфигурация в заполняющихся оболочках указана сверху, причем главное квантовое число электронов в этих состояниях указано цифрой, стоящей слева от таблицы в той же строке. Снизу указаны нормальные состояния атома в целом. Так, атом Al имеет электронную конфигурацию $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 P_{1/2}$.

Атомы благородных газов (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) занимают в таблице особое положение — в каждом из них заканчивается заполнение перечисленных в (52,1) групп состояний. Их электронные конфигурации обладают особой устойчивостью (потенциалы ионизации — наибольшие в соответствующих рядах). С этим связана и химическая инертность этих элементов.

Мы видим, что заполнение различных состояний происходит в ряду элементов главных групп очень закономерно — заполняются сначала s-, а затем p-состояния каждого главного квантового числа n. Также закономерны и электронные конфигурации ионов этих элементов (до тех пор, пока при ионизации не затрагиваются электроны d- и f-оболочек) — каждый ион имеет конфигурацию, соответствующую предыдущему атому. Так, ион Mg^+ имеет конфигурацию атома Na, ион Mg^{++} — конфигурацию Ne.

Таблица 2

Электронные конфигурации атомов элементов групп железа,
палладия и платины

Группа железа

Оболочка Ag +	$_{21}\text{Sc}$	$_{22}\text{Ti}$	$_{23}\text{V}$	$_{24}\text{Cr}$	$_{25}\text{Mn}$	$_{26}\text{Fe}$	$_{27}\text{Co}$	$_{28}\text{Ni}$
	$3d\ 4s^2$ $^2D_{3/2}$	$3d^2\ 4s^2$ 3F_2	$3d^3\ 4s^2$ $^4F_{3/2}$	$3d^5 4s$ 7S_3	$3d^5 4s^2$ $^6S_{5/2}$	$3d^6\ 4s^2$ 5D_4	$3d^7\ 4s^2$ $^4F_{9/2}$	$3d^8\ 4s^2$ 3F_4
Группа палладия								
Оболочка Kr +	$_{39}\text{Y}$	$_{40}\text{Zr}$	$_{41}\text{Nb}$	$_{42}\text{Mo}$	$_{43}\text{Tc}$	$_{44}\text{Ru}$	$_{45}\text{Rh}$	$_{46}\text{Pd}$
	$4d\ 5s^2$ $^2D_{3/2}$	$4d^2 5s^2$ 3F_2	$4d^4 5s$ $^6D_{1/2}$	$4d^5\ 5s$ 7S_3	$4d^5\ 5s^2$ $^6S_{5/2}$	$4d^7\ 5s$ 5F_5	$4d^8\ 5s$ $^4F_{9/2}$	$4d^{10}$ 1S_0
Группа платины								
Оболочка Xe +	$_{57}\text{La}$							
	$5d\ 6s^2$ $^2D_{3/2}$							
Оболочка Xe + 4f ¹⁴ +	$_{71}\text{Lu}$	$_{72}\text{Hf}$	$_{73}\text{Ta}$	$_{74}\text{W}$	$_{75}\text{Re}$	$_{76}\text{Os}$	$_{77}\text{Ir}$	$_{78}\text{Pt}$
	$5d\ 6s^2$ $^2D_{3/2}$	$5d^2\ 6s^2$ 3F_2	$5d^3\ 6s^2$ $^4F_{3/2}$	$5d^4\ 6s^2$ 5D_0	$5d^5\ 6s^2$ $^6S_{5/2}$	$5d^6\ 6s^2$ 5D_4	$5d^7 6s^2$ $^4F_{9/2}$	$5d^8\ 6s$ 3D_3

Далее, перейдем к элементам промежуточных групп. Заполнение оболочек $3d$, $4d$, $5d$ происходит в группах элементов, называемых соответственно *группами железа*,

палладия и платины. В табл. 2 приведены электронные конфигурации и термы атомов этих групп, известные из экспериментальных спектроскопических данных. Как видно из этой таблицы, заполнение d -оболочек происходит значительно менее закономерно, чем заполнение s - и p -оболочек в атомах элементов главных групп. Характерной чертой является здесь «соревнование» между s - и d -состояниями. Оно проявляется в том, что вместо закономерной последовательности конфигураций типа $d^p s^2$ с возрастающими p часто более выгодными оказываются конфигурации типа $d^{p+1} s$ или d^{p+2} . Так, в группе железа атом Cr имеет конфигурацию $3d^5 4s$, а не $3d^4 4s^2$; после Ni с восемью d -электронами следует сразу атом Cu с полностью заполненной d -оболочкой (и потому отнесенной нами к главным группам).

Такое же отсутствие закономерности наблюдается и в отношении термов ионов — электронные конфигурации ионов обычно не совпадают с конфигурацией предыдущих атомов. Например, ион V^+ имеет конфигурацию $3d^4$ (а не $3d^2 4s^2$, как Ti), ион Fe^+ — конфигурацию $3d^6 4s$ (вместо конфигураций $3d^5 4s^2$ атома Mn). Отметим, что все ионы, встречающиеся в естественном виде в кристаллах и растворах, содержат в незаполненных оболочках только d - (но не s - и p -) электроны. Так, железо встречается в кристаллах или растворах только в виде ионов Fe^{++} и Fe^{+++} , с конфигурациями соответственно $3d^6$ и $3d^5$.

Таблица 3

Электронные конфигурации атомов редкоземельных элементов

Оболочка $Xe +$	$_{59}Ce$	$_{60}Pr$	$_{61}Nd$	$_{62}Pm$	$_{63}Sm$	$_{64}Eu$
	$4f^2 6s^2$ 3H_4	$4f^3 6s^2$ $^4I_{9/2}$	$4f^4 6s^2$ 6I_4	$4f^5 6s^2$ $^6H_{5/2}$	$4f^6 6s^2$ 7F_0	$4f^7 6s^2$ $^8S_{7/2}$
	$_{64}Gd$	$_{65}Tb$	$_{66}Dy$	$_{67}Ho$	$_{68}Er$	$_{69}Tm$
	$4f^7 5d 6s^2$ 9D_2	$4f^8 5d 6s^2$ $^8H_{17/2}$	$4f^{10} 6s^2$ 6I_8	$4f^{11} 6s^2$ $^4I_{15/2}$	$4f^{12} 6s^2$ 3H_8	$4f^{13} 6s^2$ $^2F_{7/2}$
	$_{70}Yb$	$_{71}Lu$	$_{72}Hf$	$_{73}Ta$	$_{74}W$	$_{75}Re$
	$4f^{14} 6s^2$ 1S_0	$4f^{14} 5d 6s^2$ 1D_2	$4f^{14} 5d^2 6s^2$ 3F_4	$4f^{14} 5d^3 6s^2$ $^4F_{3/2}$	$4f^{14} 5d^4 6s^2$ 5G_4	$4f^{14} 5d^5 6s^2$ $^6F_{5/2}$

Аналогичное положение имеет место и при заполнении $4f$ -оболочки, происходящем в ряду элементов под названием *редкоземельных* (табл. 3). Заполнение $4f$ -оболочки тоже происходит не вполне закономерным образом, характеризуясь «соревнованием» между $4f$, $5d$ - и $6s$ -состояниями.

Последняя группа промежуточных элементов начинается с актиния. В ней происходит заполнение $6d$ - и $5f$ -оболочек, аналогичное заполнению в ряду редкоземельных элементов.

§ 53. Рентгеновские термы

Энергия связи внутренних электронов в атоме настолько велика, что если такой электрон переходит во внешнюю незаполненную оболочку (или вообще удаляется из атома), то возбужденный атом (или ион) оказывается механически неустойчивым по отношению к ионизации, сопровождающейся перестройкой электронной оболочки и образованием устойчивого иона. Однако ввиду сравнительной слабости электронных взаимодействий в атоме вероятность такого перехода все же сравнительно мала, так что продолжительность жизни τ возбужденного состояния велика. Поэтому ширина уровня $\hbar/\tau$ (§ 38) оказывается достаточно малой для того, чтобы имело смысл рассматривать энергии атома с возбужденным внутренним электроном как дискретные уровни энергии «квазистационарных» состояний атома. Эти уровни называются *рентгеновскими термами* ¹⁾.

Рентгеновские термы классифицируются прежде всего указанием оболочки, из которой удален электрон, или, как говорят, в которой образовалась «дырка». Куда именно при этом попал электрон — почти не отражается на энергии атома и поэтому несущественно.

Полный момент совокупности электронов, заполняющих некоторую оболочку, равен нулю. После удаления из нее одного электрона оболочка приобретает некоторый момент j . Для оболочки (n, l) момент j может принимать значения $j = l \pm \frac{1}{2}$. Таким образом, мы получим уровни, которые можно было бы обозначить посредством $1s_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$,

¹⁾ Название связано с тем, что переходы между этими уровнями приводят к испусканию атомом рентгеновских лучей.

$2p_{1/2}, \dots$, где значение j приписывается в виде индекса к символу, указывающему местонахождение «дырки». Общеприняты, однако, специальные символы со следующим соответствием:

$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$	$3s_{1/2}$	$3p_{1/2}$	$3p_{3/2}$	$3d_{3/2}$	$3d_{5/2} \dots$
K	L_I	L_{II}	L_{III}	M_I	M_{II}	M_{III}	M_{IV}	$M_V \dots$

Уровни с одинаковыми n (обозначаемые одинаковой большой буквой) расположены близко друг от друга и далеко от уровней с другими n . Причина этого заключается в том, что благодаря сравнительной близости внутренних электронов к ядру, поле, в котором они находятся, является почти не экранированным кулоновым полем ядра. В связи с этим их состояния «водородоподобны», т. е. их энергия приближенно совпадает с той, которую имел бы один электрон в поле ядра с зарядом Ze ; но последняя зависит только от главного квантового числа n (§ 31).

Учет релятивистских эффектов приводит к отделению друг от друга термов с различными j , — например, L_I и L_{II} от L_{III} ; M_I и M_{II} от M_{III} и M_{IV} . Такие пары уровней называют *релятивистскими дублетами*.

Разделение же термов с различными l при одинаковом j (например, L_I от L_{II} , M_I от M_{II}) связано с отклонением поля, в котором находятся внутренние электроны, от кулонова поля ядра, т. е. с учетом взаимодействия электрона с другими электронами. Такие дублеты называют *экранированными*.

Ширина рентгеновского терма определяется суммарной вероятностью всех возможных процессов перестройки электронной оболочки с заполнением данной «дырки». В тяжелых атомах основную роль играют при этом переходы дырки из данной оболочки в более высокую (т. е. обратные переходы электрона из более высоких в более низкое состояние), сопровождающиеся испусканием рентгеновского кванта. Вероятность этих «радиационных» переходов, а с ними и соответствующая часть ширины уровня быстро растет с увеличением атомного номера.

Для более легких атомов существенную или даже преобладающую роль в определении ширины уровня играют безызлучательные переходы, в которых энергия, освобождающаяся при заполнении дырки более высоким электро-

ном, используется для вырывания из атома другого внутреннего электрона (так называемый *эффект Оже*). В результате такого процесса атом остается в состоянии с двумя дырками.

§ 54. Атом в электрическом поле

В классической теории электрические свойства системы частиц характеризуются ее электрическими мультипольными моментами различного порядка (см. I §§ 62, 63). В квантовой теории определения этих величин сохраняют тот же вид, но должны рассматриваться как операторные.

Первым из мультипольных моментов является дипольный момент, определяемый как вектор,

$$\mathbf{d} = \sum e \mathbf{r}. \quad (54,1)$$

Для атома (ядро которого подразумевается неподвижным в начале координат) суммирование производится по всем электронам в его оболочке (индекс, нумерующий электроны, для краткости опускаем). Среднее значение дипольного момента в стационарном состоянии атома получится усреднением оператора (54,1) по волновой функции этого состояния, т. е. взятием соответствующего диагонального матричного элемента. Но матричные элементы оператора (54,1) — как и всякого полярного вектора (см. § 19) — обращаются в нуль для переходов между двумя состояниями одинаковой четности. Поэтому во всяком случае обращаются в нуль диагональные элементы, так что средние значения дипольного момента атома в стационарных состояниях равны нулю ¹⁾.

¹⁾ Здесь подразумевается, что уровни энергии атома вырождены только по направлениям его полного момента. Все состояния, отличающиеся только значениями проекции полного момента, имеют одинаковую четность, а потому обладает определенной (той же) четностью также и любая их суперпозиция. Исключение в этом смысле представляет атом водорода, уровни которого обладают также и «случайным» вырождением. Взаимно вырожденные состояния с различными значениями орбитального момента l могут обладать различными четностями. Из их волновой функции можно составить суперпозиции, которые вообще не обладали бы определенной четностью; соответствующие им диагональные матричные элементы дипольного момента не должны обращаться в нуль.

Квадрупольный момент системы определяется как симметричный тензор

$$Q_{ik} = \sum e (3x_i x_k - \delta_{ik} r^2) \quad (54,2)$$

с равной нулю суммой диагональных членов.

Отметим прежде всего, что средние значения квадрупольного момента атома равны нулю во всех состояниях с полными моментами $J=0$ или $J=\frac{1}{2}$. В этом можно убедиться с помощью указанного в § 18 способа нахождения правил отбора для матричных элементов векторов и тензоров. Следуя этому способу, тензору (54,2) формально ставим в соответствие «момент» $L=2$. Матричный элемент отличен от нуля, если при сложении этого «момента» с моментами J_1 и J_2 начального и конечного состояний можно получить значение 0. Но из трех моментов 2, 0, 0 или 2, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ такое значение получить нельзя и потому диагональные матричные элементы с $J_1=J_2=0$ или $J_1=J_2=\frac{1}{2}$ обращаются в нуль.

Для состояния атома с заданным полным моментом J средние значения квадрупольного момента зависят еще от значения проекции момента M_J . Найдём эту зависимость.

Усреднение оператора (54,2) по состоянию атома целесообразно производить в два этапа (ср. § 51). Сначала производим усреднение по состояниям с заданным значением J , но не M_J . Усредненный таким образом оператор (обозначим его через $\hat{Q}_{ik}$) может выражаться лишь через операторы величин, характеризующих состояние атома в целом. Единственным таким вектором является «вектор» $\hat{J}$. Поэтому оператор $\hat{Q}_{ik}$ должен иметь вид

$$\hat{Q}_{ik} = \frac{3Q}{2J(2J-1)} \left(\hat{J}_i \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_i - \frac{2}{3} \delta_{ik} \hat{J}^2 \right), \quad (54,3)$$

где выражение в скобках составлено так, чтобы быть симметричным по индексам i, k и давать нуль при суммировании по $i=k$ (о смысле коэффициента Q — см. ниже). Операторы $\hat{J}_i$ надо понимать здесь как известные нам (§ 15) матрицы по отношению к состояниям с различными значениями M_J .

Поскольку три компоненты вектора момента не могут одновременно иметь определенных значений, то то же самое относится и к компонентам тензора (54,3). Для компоненты

$\hat{Q}_{zz}$ имеем

$$\hat{Q}_{zz} = \frac{3Q}{J(2J-1)} \left(\hat{J}_z^2 - \frac{1}{3} \hat{\mathbf{J}}^2 \right).$$

Усреднение этого оператора по состоянию с заданными значениями J и M_J состоит теперь просто в замене операторов их собственными значениями. Таким образом, находим

$$\bar{Q}_{zz} = \frac{3Q}{J(2J-1)} \left[M_J^2 - \frac{1}{3} J(J+1) \right], \quad (54,4)$$

чем и определяется искомая зависимость. При $M_J = J$ (момент направлен «целиком» по оси z) имеем $\bar{Q}_{zz} = Q$; эту величину и называют обычно просто *квадрупольным моментом*.

Рассмотрим атом, помещенный в однородное электрическое поле $\mathbf{E}$. В таком атоме мы имеем дело с системой электронов, находящихся в аксиально-симметричном поле (поле ядра вместе с внешним однородным полем). В связи с этим полный момент атома $\mathbf{J}$ перестает сохраняться, но продолжает сохраняться его проекция на направление оси симметрии (ось z).

Выделяя собой определенное направление в пространстве, внешнее поле снимает вырождение уровней по направлениям момента: состояния, отличающиеся значениями $J_z = M_J$ и имевшие в свободном атоме одинаковую энергию, в электрическом поле приобретают различную энергию (так называемый *эффект Штарка*). Расщепление уровней, однако, остается неполным: энергии состояний, отличающихся лишь знаком M_J , остаются одинаковыми. Это обстоятельство является непосредственным следствием симметрии по отношению к обращению времени (§ 23). Меняя на обратное направление всех скоростей, обращение времени меняет знак проекции момента, оставляя энергию системы неизменной; остается неизменным также и поле $\mathbf{E}$ (см. I § 44).

Таким образом, уровни энергии атома в электрическом поле остаются двукратно вырожденными, за исключением лишь уровней с $M_J = 0$. Но если полный момент J — полуцелый, то значение $M_J = 0$ невозможно, и тогда остаются двукратно вырожденными все уровни без исключения. Это обстоятельство является частным случаем более общего правила: можно показать (исходя из требований симметрии

по отношению к обращению времени), что для системы с полуцелым J двукратное вырождение уровней остается в произвольном (а не только однородном) электрическом поле (так называемая *теорема Крамерса*)¹⁾.

Если электрическое поле достаточно слабо — настолько, что обуславливаемая им дополнительная энергия мала по сравнению с расстояниями между соседними невозмущенными уровнями энергии атома, — то для вычисления смещения уровней можно пользоваться теорией возмущений. В однородном поле оператором возмущения является при этом потенциальная энергия атома в поле, выраженная через его дипольный момент:

$$V = -\mathbf{E}d = -|\mathbf{E}|d_z. \quad (54,5)$$

В первом приближении смещение уровней определяется соответствующими диагональными матричными элементами оператора возмущения. Эти элементы, однако, обращаются в нуль ввиду равенства нулю средних значений дипольного момента. Поэтому расщепление уровней в электрическом поле появляется лишь во втором приближении теории возмущений и соответственно этому пропорционально квадрату поля²⁾.

Как квадратичная по полю величина, смещение ΔE_n уровня E_n должно выражаться формулой вида

$$\Delta E_n = -\frac{1}{2} \alpha_{ik}^{(n)} E_i E_k, \quad (54,6)$$

где коэффициенты $\alpha_{ik}^{(n)}$ составляют симметричный тензор второго ранга; выбрав ось z в направлении поля, получим

$$\Delta E_n = -\frac{1}{2} \alpha_{zz}^{(n)} |\mathbf{E}|^2. \quad (54,7)$$

Фигурирующие в этих формулах коэффициенты имеют еще и другой смысл: они представляют собой в то же время поляризуемость атома во внешнем электрическом поле.

¹⁾ Подчеркнем, однако, что в произвольном электрическом поле состояния атома уже не могут характеризоваться значениями проекции момента, так как в неоднородном поле не сохраняется не только абсолютная величина момента вектора, но и все его компоненты.

²⁾ Исключение составляет атом водорода, для стационарных состояний которого среднее значение дипольного момента может быть отлично от нуля. Поэтому расщепление уровней энергии атома водорода линейно по полю.

Это утверждение следует из общей формулы

$$\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right)_{nn} = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}. \quad (54,8)$$

Здесь слева стоит диагональный матричный элемент оператора $\partial \hat{H} / \partial \lambda$, где $\hat{H}$ — гамильтониан системы, зависящий от некоторого параметра λ ; вместе с гамильтонианом функциями того же параметра λ являются и его собственные значения E_n . Если понимать в этой формуле под параметром λ величину поля $|\mathbf{E}|$ и положить

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}_0 - |\mathbf{E}| d_z,$$

то мы получим, используя выражение (54,7),

$$\bar{d}_z = \alpha_{zz}^{(n)} |\mathbf{E}|. \quad (54,9)$$

Поляризуемостью атома как раз и называется коэффициент пропорциональности между приобретаемым им в поле дипольным моментом и величиной поля.

Для доказательства же формулы (54,8) исходим из уравнения

$$(\hat{H} - E_n) \psi_n = 0,$$

определяющего собственные значения оператора $\hat{H}$. Продифференцировав это уравнение по λ и затем умножив его слева на ψ_n^* , получим

$$\psi_n^* (\hat{H} - E_n) \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} = \psi_n^* \left(\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right) \psi_n.$$

При интегрировании этого равенства по dq левая сторона обращается в нуль, поскольку ввиду эрмитовости оператора $\hat{H}$ имеем (см. (3,10))

$$\int \psi_n^* (\hat{H} - E_n) \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} dq = \int \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} (\hat{H}^* - E_n) \psi_n^* dq$$

а $(\hat{H}^* - E_n) \psi_n^* = 0$. Правая же сторона дает искомую формулу.

§ 55. Атом в магнитном поле

Рассмотрим атом, находящийся в однородном магнитном поле $\mathbf{H}$. Согласно (43,4) его гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_a \left[\hat{\mathbf{p}}_a + \frac{|e|\hbar}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \right]^2 + U + \frac{\hbar|e|}{mc} \mathbf{H} \hat{\mathbf{S}}, \quad (55,1)$$

где суммирование производится по всем электронам (заряд электрона написан как $e = -|e|$); U — энергия взаимодействия электронов с ядром и друг с другом; $\hat{\mathbf{S}} = \sum \hat{\mathbf{s}}_a$ — оператор полного (электронного) спина атома.

Выберем векторный потенциал однородного поля в виде

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathbf{H} \mathbf{r}] \quad (55,2)$$

(см. I § 46). Легко видеть, что при таком выборе оператор $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ коммутативен с $\mathbf{A}$. Действительно, при воздействии на какую-либо функцию $\psi(\mathbf{r})$ имеем

$$(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}})\psi = -i\hbar \nabla(\mathbf{A}\psi) + i\hbar \mathbf{A} \nabla\psi = -i\hbar \psi \operatorname{div} \mathbf{A},$$

т. е.

$$\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \operatorname{div} \mathbf{A}.$$

Но для вектора (55,2) $\operatorname{div} \mathbf{A} = -\frac{1}{2} \mathbf{H} \operatorname{rot} \mathbf{r} = 0$. Учитывая это обстоятельство при раскрытии квадрата в (55,1), перепишем гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{mc} \sum_a \mathbf{A}_a \hat{\mathbf{p}}_a + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \mathbf{A}_a^2 + \frac{|e|\hbar}{mc} \mathbf{H} \hat{\mathbf{S}},$$

где $\hat{H}_0$ — гамильтониан атома в отсутствие поля. Подставив сюда $\mathbf{A}$ из (55,2), получим

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{2mc} \mathbf{H} \sum_a [\mathbf{r}_a \hat{\mathbf{p}}_a] + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a [\mathbf{H} \mathbf{r}_a]^2 + \frac{|e|\hbar}{mc} \mathbf{H} \hat{\mathbf{S}}.$$

Но векторное произведение $[\mathbf{r}_a \hat{\mathbf{p}}_a]$ есть оператор орбитального момента электрона, а суммирование по всем электронам дает оператор $\hbar \hat{\mathbf{L}}$ полного орбитального момента атома.

Таким образом,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B (\hat{L} + 2\hat{S}) \cdot \mathbf{H} + \frac{e^2}{8\pi c^2} \sum_a [\mathbf{H} \mathbf{r}_a]^2, \quad (55,3)$$

где μ_B — магнетон Бора.

Как и электрическое поле, внешнее магнитное поле расщепляет атомные уровни, снимая вырождение по направлениям полного момента (*эффект Зеемана*). Определим энергию этого расщепления для атомных уровней, характеризующихся определенными значениями квантовых чисел J, L, S (т. е. предполагая для них случай LS -связи — см. § 51).

Будем считать магнитное поле настолько слабым, что $\mu_B |\mathbf{H}|$ мало по сравнению с расстояниями между уровнями энергии атома, в том числе по сравнению с интервалами тонкой структуры уровней. Тогда второй и третий члены в (55,3) можно рассматривать как возмущение, причем невозмущенными уровнями являются отдельные компоненты мультиплетов. В первом приближении третьим членом, квадратичным по полю, можно пренебречь по сравнению с линейным вторым членом.

В первом приближении теории возмущений энергия расщепления ΔE определяется средними значениями возмущения в состояниях (невозмущенных), отличающихся значениями проекции полного момента на направление поля. Выбрав это направление в качестве оси z , имеем

$$\Delta E = \mu_B |\mathbf{H}| (\bar{L}_z + 2\bar{S}_z) = \mu_B |\mathbf{H}| (\bar{J}_z + \bar{S}_z). \quad (55,4)$$

Среднее значение $\bar{J}_z$ совпадает просто с заданным собственным значением $J_z = M_J$. Среднее же значение $\bar{S}_z$ можно найти следующим образом с помощью «поэтапного» усреднения (см. § 51).

Усредним сначала оператор $\hat{S}$ по состоянию атома с заданными значениями S, L и J , но не M_J . Усредненный таким образом оператор $\bar{\hat{S}}$ может быть «направлен» лишь вдоль $\hat{\mathbf{J}}$ — единственного сохраняющегося «вектора», характеризующего свободный атом. Поэтому можно написать

$$\bar{\hat{S}} = \text{const} \cdot \hat{\mathbf{J}}.$$

В таком виде, однако, это равенство имеет лишь условный смысл, поскольку три компоненты вектора $\mathbf{J}$ не могут одновременно иметь определенных значений. Буквальный же смысл имеют его z -проекция

$$\bar{S}_z = \text{const} \cdot J_z = \text{const} \cdot M_J$$

и равенство

$$\bar{\mathbf{S}}\mathbf{J} = \text{const} \cdot \mathbf{J}^2 = \text{const} \cdot J(J+1),$$

получающееся умножением обоих его сторон на $\mathbf{J}$. Внося сохраняющийся вектор $\mathbf{J}$ под знак среднего, пишем $\bar{\mathbf{S}}\mathbf{J} = \overline{\mathbf{S}\mathbf{J}}$. Среднее же значение $\overline{\mathbf{S}\mathbf{J}}$ совпадает с собственным значением

$$\mathbf{S}\mathbf{J} = \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)],$$

которому оно равно в состоянии с определенными значениями L^2 , S^2 , J^2 (согласно формуле (17,3), в которой надо понимать в данном случае под L_1 , L_2 , L соответственно S , L , J). Определив const из второго равенства и подставив в первое, имеем, таким образом,

$$S_z = M_J \frac{JS}{J^2}. \quad (55,5)$$

Собрав полученные выражения и подставив в (55,4), находим следующее окончательное выражение для энергии расщепления

$$\Delta E = \mu_{BG} M_J |\mathbf{H}|, \quad (55,6)$$

где

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \quad (55,7)$$

есть так называемый *множитель Ланде* или *гиромагнитный множитель*. Отметим, что $g=1$, если спин отсутствует ($S=0$, так что $J=L$), и $g=2$, если $L=0$ (так что $J=S$).

Формула (55,6) дает различные значения энергии для всех $2J+1$ значений $M_J = J, J-1, \dots, -J$. Другими словами, магнитное поле полностью снимает вырождение уровней по направлениям момента, — в противоположность электрическому полю, оставлявшему нерасщепленными

уровни с $M_J = \pm |M_J|^{1/2}$). Отметим, однако, что линейное расщепление, определяемое формулой (55,6), отсутствует, если $g=0$ (что возможно и при $J \neq 0$, например, для состояний $^4D_{1/2}$).

Мы видели в предыдущем параграфе, что существует связь между сдвигом уровня энергии атома в электрическом поле и его средним электрическим дипольным моментом. Аналогичная связь существует и в магнитном случае. Потенциальная энергия системы зарядов в однородном магнитном поле в классической теории дается выражением $-\mu \mathbf{H}$, где μ — магнитный момент системы. В квантовой теории она заменяется соответствующим оператором, так что гамильтониан системы

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{\mu} \mathbf{H} = \hat{H}_0 - \hat{\mu}_z |\mathbf{H}|.$$

Применив теперь формулу (54,8) (с полем $|\mathbf{H}|$ в качестве параметра λ), найдем, что среднее значение магнитного момента

$$\bar{\mu}_z = - \frac{\partial \Delta E}{\partial |\mathbf{H}|}, \quad (55,8)$$

где ΔE — сдвиг уровня энергии данного состояния атома. Подставив сюда (55,6), мы видим, что атом в состоянии с определенным значением M_J проекции полного момента на некоторое направление z обладает средним магнитным моментом в том же направлении:

$$\bar{\mu}_z = - \mu_B g M_J. \quad (55,9)$$

Если атом не обладает ни спином, ни орбитальным моментом ($S=L=0$), то второй член в (55,3) не дает смещения уровня ни в первом, ни в более высоких приближениях (так как все матричные элементы от $\mathbf{L}$ и $\mathbf{S}$ исчезают). Поэтому весь эффект связан в этом случае с третьим членом в (55,3) и в первом приближении теории возмущения

¹⁾ Рассуждения, примененные в этой связи в предыдущем параграфе к электрическому случаю, для магнитного поля не годятся. Дело в том, что операция обращения времени должна сопровождаться заменой $\mathbf{H} \rightarrow -\mathbf{H}$ (см. I § 44). Поэтому состояния, получающиеся друг из друга в результате этой операции, относятся по существу к атому в различных, а не в одном и том же полях.

смещение уровня равно среднему значению

$$\Delta E = \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a \overline{[\mathbf{H}\mathbf{r}_a]^2}. \quad (55,10)$$

Написав $[\mathbf{H}\mathbf{r}_a]^2 = H^2 r_a^2 \sin^2 \theta_a$ (где θ_a — угол между $\mathbf{H}$ и $\mathbf{r}_a$), усредним по направлениям $\mathbf{r}_a$. Состояние атома с $L=S=0$ сферически симметрично. Поэтому усреднение по направлениям производится независимо от усреднения по расстояниям r_a и дает $\overline{\sin^2 \theta_a} = 1 - \overline{\cos^2 \theta_a} = 2/3$. Таким образом,

$$\Delta E = \frac{e^2}{12mc^2} H^2 \sum_a \overline{r_a^2}. \quad (55,11)$$

Магнитный момент атома, вычисленный по формуле (55,8), будет теперь пропорционален величине поля (атом с $L=S=0$ в отсутствие поля магнитным моментом, конечно, не обладает). Написав его в виде $\chi |\mathbf{H}|$, мы можем рассматривать коэффициент χ как магнитную восприимчивость атома. Для нее получим следующую формулу Ланжевена:

$$\chi = -\frac{e^2}{6mc^2} \sum_a \overline{r_a^2}. \quad (55,12)$$

Эта величина отрицательна, т. е. атом диамагнитен.

Глава VIII

ДВУХАТОМНАЯ МОЛЕКУЛА

§ 56. Электронные термы двухатомной молекулы

В теории молекул основную роль играет тот факт, что массы ядер атомов очень велики по сравнению с массой электронов. Благодаря такой разнице в массах скорости движения ядер в молекуле малы по сравнению со скоростями электронов. Это дает возможность рассматривать электронное движение при неподвижных ядрах, расположенных на заданных расстояниях друг от друга. Определяя уровни энергии U_n такой системы, мы найдем, как говорят, *электронные термы* молекулы. В противоположность атомам, где энергетические уровни представляли собой определенные числа, здесь электронные термы являются не числами, а функциями от параметров — расстояний между ядрами в молекуле. В энергию U_n включается также и электростатическая энергия взаимодействия ядер друг с другом, так что U_n представляет собой полную энергию молекулы при заданном расположении неподвижных ядер.

Наиболее полное теоретическое исследование допускает простейший тип молекул — *двухатомные*, которые и будут рассмотрены в этой главе. Электронные термы двухатомной молекулы являются функциями всего одного параметра — расстояния r между ядрами.

Одним из основных принципов классификации атомных термов была классификация по значениям полного орбитального момента L . В молекулах же вообще не имеет места закон сохранения полного орбитального момента электронов, поскольку электрическое поле нескольких ядер не обладает центральной симметрией.

В двухатомных молекулах, однако, поле обладает аксиальной симметрией относительно оси, проходящей через

оба ядра. Поэтому здесь сохраняется проекция орбитального момента на эту ось и мы можем классифицировать электронные термы молекул по значениям этой проекции. Абсолютную величину проекции орбитального момента на ось молекулы принято обозначать буквой Λ ; она пробегает значения $0, 1, 2, \dots$. Термы с различными значениями Λ обозначают большими греческими буквами, соответствующими латинским символам атомных термов с различными L . Так, при $\Lambda=0, 1, 2$ говорят, соответственно, о Σ -, Π -, Δ -термах.

Далее, каждое электронное состояние молекулы характеризуется полным спином S всех электронов в молекуле. В пренебрежении всеми релятивистскими взаимодействиями (т. е. тонкой структурой терма — ср. § 51) электронный терм со спином S вырожден с кратностью $2S+1$ по направлениям спина. Число $2S+1$, как и в атомах, называется *мультиплетностью* терма и пишется в виде индекса у символа терма; так, $^3\Pi$ обозначает терм с $\Lambda=1, S=1$.

Наряду с поворотами на произвольный угол вокруг оси симметрии молекулы допускает также и отражение в любой плоскости, проходящей через эту ось. Если произвести такое отражение, то энергия молекулы останется неизменной. Получающееся же в результате состояние не будет, однако, вполне тождественным с исходным: при отражении в плоскости, проходящий через ось молекулы, изменится знак момента относительно этой оси ¹⁾. Таким образом, мы приходим к результату, что все электронные термы с отличным от нуля значением Λ двукратно вырождены — каждому значению энергии соответствуют два состояния, отличающиеся направлением проекции орбитального момента на ось молекулы. Что же касается случая $\Lambda=0$, то здесь при отражении состояние молекулы вообще не меняется, так что Σ -термы не вырождены. Волновая функция Σ -терма в результате отражения может лишь умножиться на постоянную. Поскольку двукратное отражение в одной и той же плоскости сводится к тождественному преобразованию, то эта постоянная равна ± 1 . Таким образом, надо различать Σ -термы, волновая функция кото-

¹⁾ Действительно, пусть отражение происходит в плоскости xz , причем ось z совпадает с осью молекулы. При этом преобразовании меняют знак лишь y -компоненты векторов $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$, поэтому величина $[\mathbf{r}\mathbf{p}]_z = x p_y - y p_x$ меняет знак.

рых не меняется вовсе при отражении, и термы, волновая функция которых меняет знак. Первые обозначаются посредством Σ^+ , а вторые — как Σ^- .

Если молекула состоит из двух одинаковых атомов, то появляется новая симметрия, а с нею и дополнительная характеристика электронных термов. Именно, двухатомная молекула с одинаковыми ядрами обладает еще и центром симметрии относительно точки, делящей пополам линию, соединяющую ядра (начало координат выбираем в этой точке). Поэтому гамильтониан инвариантен относительно одновременного изменения знака координат всех электронов в молекуле (при неизменных координатах ядер). Поскольку оператор этого преобразования коммутативен также и с оператором орбитального момента, то мы получаем возможность классифицировать термы с определенными значениями Λ еще и по их четности: волновая функция *четных* (g) состояний не меняется при изменении знака координат электронов, а *нечетных* (u) — меняет знак. Индексы u, g , указывающие четность, принято писать внизу при символе термина: Π_u, Π_g и т. п.

Эмпирически известно, что у подавляющего большинства химически устойчивых двухатомных молекул нормальное электронное состояние обладает полной симметрией — электронная волновая функция инвариантна по отношению ко всем преобразованиям симметрии молекулы. В подавляющем большинстве случаев в нормальном состоянии также равен нулю полный спин S (к этому обстоятельству мы еще вернемся в § 58). Другими словами, основной терм молекулы есть ${}^1\Sigma^+$, а если молекула состоит из одинаковых атомов — то ${}^1\Sigma_g^+$. Известными исключениями из этих правил являются молекулы O_2 (нормальный терм ${}^3\Sigma_g^-$) и NO (нормальный терм ${}^2\Pi$).

§ 57. Пересечение электронных термов

Электронные термы двухатомной молекулы как функции расстояния r между ядрами можно изображать графически, откладывая энергию как функцию от r . Существенный интерес представляет вопрос о пересечении кривых, изображающих различные термы.

Пусть $U_1(r), U_2(r)$ — два различных электронных термина. Если они пересекаются в некоторой точке, то вблизи этой

точки функции U_1 , U_2 будут иметь близкие значения. Для решения вопроса о возможности такого пересечения удобно поставить задачу следующим образом.

Рассмотрим точку r_0 , в которой функции $U_1(r)$, $U_2(r)$ имеют очень близкие, но не совпадающие значения (обозначим их как E_1 и E_2), и посмотрим, нельзя ли сделать U_1 и U_2 равными, сместив точку на малую величину δr . Энергии E_1 и E_2 представляют собой собственные значения гамильтониана $\hat{H}_0$ системы электронов в поле ядер, находящихся на расстоянии r_0 друг от друга. Если дать расстоянию r приращение δr , то гамильтониан перейдет в $\hat{H}_0 + \hat{V}$, где $\hat{V} = \delta r \partial \hat{H}_0 / \partial r$ есть малая поправка; значения функций U_1 , U_2 в точке $r_0 + \delta r$ можно рассматривать как собственные значения нового гамильтониана. Такой способ рассмотрения позволяет определить значения термов $U_1(r)$, $U_2(r)$ в точке $r_0 + \delta r$ с помощью теории возмущений, причем $\hat{V}$ рассматривается как возмущение к оператору $\hat{H}_0$.

Обычный метод теории возмущений здесь, однако, неприменим, так как собственные значения энергии E_1 , E_2 невозмущенной задачи очень близки друг к другу и их разность, вообще говоря, не велика по сравнению с величиной возмущения (условие (32,9) не выполнено). Поскольку в пределе равной нулю разности $E_2 - E_1$ мы придем к случаю вырожденных собственных значений, то естественно применить к случаю близких собственных значений метод, аналогичный развитому в § 33.

Пусть ψ_1 , ψ_2 — собственные функции невозмущенного оператора $\hat{H}_0$, соответствующие энергиям E_1 , E_2 . В качестве исходного нулевого приближения возьмем вместо самих ψ_1 и ψ_2 их линейные комбинации

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2. \quad (57,1)$$

Подставляя это выражение в возмущенное уравнение

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi, \quad (57,2)$$

получим

$$c_1 (E_1 + \hat{V} - E) \psi_1 + c_2 (E_2 + \hat{V} - E) \psi_2 = 0.$$

Умножая это уравнение слева поочередно на ψ_1^* и ψ_2^* и

интегрируя, получим два алгебраических уравнения:

$$\begin{aligned}c_1(E_1 + V_{11} - E) + c_2 V_{12} &= 0, \\c_1 V_{21} + c_2(E_2 + V_{22} - E) &= 0,\end{aligned}$$

где $V_{ik} = \int \psi_i^* \hat{V} \psi_k dq$. В силу эрмитовости оператора $\hat{V}$ величины V_{11} и V_{22} вещественны, а $V_{12} = V_{21}^*$. Условие совместности этих уравнений:

$$\begin{vmatrix} E_1 + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & E_2 + V_{22} - E \end{vmatrix} = 0,$$

откуда

$$E = \frac{1}{2}(E_1 + E_2 + V_{11} + V_{22}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_1 - E_2 + V_{11} - V_{22})^2 + |V_{12}|^2}. \quad (57,3)$$

Этой формулой и определяются искомые собственные значения энергии в первом приближении.

Если значения энергии обоих термов в точке $r_0 + \delta r$ становятся равными (термы пересекаются), то это значит, что оба значения E , определяемые формулой (57,3), совпадают. Для этого необходимо, чтобы подкоренное выражение в (57,3) обратилось в нуль. Поскольку оно является суммой двух квадратов, то мы получаем в качестве условия наличия точек пересечения термов уравнения

$$E_1 - E_2 + V_{11} - V_{22} = 0, \quad V_{12} = 0. \quad (57,4)$$

Между тем, в нашем распоряжении имеется всего один произвольный параметр, определяющий возмущение $\hat{V}$, — величина δr смещения. Поэтому два (предполагаем, что функции ψ_1, ψ_2 выбраны вещественными; тогда V_{12} тоже вещественно) уравнения (57,4) не могут быть, вообще говоря, удовлетворены одновременно.

Может, однако, случиться, что матричный элемент V_{12} обращается в нуль тождественно; тогда остается всего одно уравнение (57,4), которое может быть удовлетворено надлежащим подбором δr . Это имеет место во всех случаях, когда два рассматриваемых терма обладают различной симметрией. Под симметрией мы подразумеваем здесь все возможные виды симметрии — по отношению к вращениям вокруг оси, отражениям в плоскостях, инверсии, а также

по отношению к перестановкам электронов. У двухатомной молекулы это значит, что речь может идти о термах с различными Λ , различной четности или мультиплетности, а для Σ -термов — еще о Σ^+ и Σ^- .

Справедливость этого утверждения связана с тем, что оператор $\hat{V}$ (как и сам гамильтониан) коммутативен со всеми операторами симметрии молекулы — оператором момента относительно оси, операторами отражений и инверсии, операторами перестановок электронов. В §§ 18, 19 было показано, что для скалярной величины, оператор которой коммутативен с операторами момента и инверсии, отличны от нуля матричные элементы только для переходов между состояниями одинакового момента и четности. Это доказательство по существу в том же виде сохраняется и в общем случае произвольного оператора симметрии.

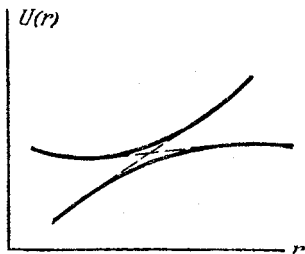


Рис. 12.

Таким образом, мы приходим к результату, что у двухатомной молекулы могут пересекаться лишь термы различной симметрии, пересечение же термов одинаковой симметрии невозможно (Е. Вигнер, И. Нейман, 1929). Если в результате какого-либо приближенного расчета мы получили бы два пересекающихся терма одинаковой симметрии, то при вычислении следующего приближения они окажутся раздвинутыми, как это показано на рис. 12 сплошными линиями.

§ 58. Валентность

Свойство атомов соединяться друг с другом, образуя молекулу, описывается с помощью понятия о *валентности*. Каждому атому приписывается определенная валентность и при соединении атомов их валентности должны взаимно насыщаться, т. е. каждой валентной связи атома должна соответствовать валентная связь другого атома. Например, в молекуле метана CH_4 четыре валентных связи четырехвалентного атома углерода насыщаются валентными связями четырех одновалентных атомов водорода. Приступая

к физическому истолкованию валентности, начнем с простейшего примера — соединения двух атомов водорода в молекулу H_2 .

Рассмотрим два атома водорода, находящихся в основном состоянии (2S). При их сближении может получиться система, находящаяся в молекулярном состоянии $^1\Sigma_g^+$ или $^3\Sigma_u^+$.

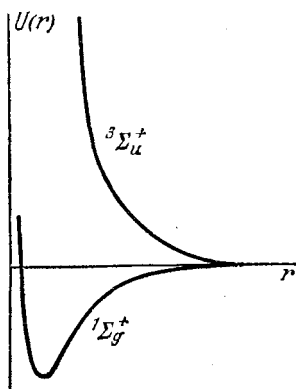


Рис. 13.

Синглетный терм соответствует антисимметричной спиновой волновой функции, а триплетный терм — симметричной волновой функции. Координатная же волновая функция, напротив, у терма $^1\Sigma$ симметрична, а у терма $^3\Sigma$ — антисимметрична. Очевидно, что основным термом молекулы H_2 может быть только терм $^1\Sigma$. Действительно, антисимметричная волновая функция $\varphi(r_1, r_2)$ (r_1, r_2 — радиус-векторы обоих электронов) во всяком случае обладает узлами (она обращается в нуль при $r_1=r_2$), а потому не может

относиться к наиболее низкому состоянию системы.

Численный расчет показывает, что электронный терм $^1\Sigma$ действительно имеет глубокий минимум, соответствующий образованию устойчивой молекулы H_2 . В состоянии же $^3\Sigma$ энергия $U(r)$ монотонно падает с увеличением расстояния между ядрами, что соответствует взаимному отталкиванию обоих атомов H (рис. 13)¹⁾.

Таким образом, в основном состоянии полный спин молекулы водорода равен нулю: $S=0$. Оказывается, что этим свойством обладают молекулы практически всех химически устойчивых соединений элементов главных групп. Среди неорганических молекул исключение представляют двухатомные молекулы O_2 (основное состояние $^3\Sigma$) и NO (основное состояние $^2\Pi$) и трехатомные молекулы NO_2 , ClO_2 .

¹⁾ Мы отвлекаемся здесь от сил ван-дер-ваальсового притяжения между атомами (см. § 61). Существование этих сил означает наличие минимума (расположенного на больших расстояниях) и на кривой $U(r)$ терма $^3\Sigma$. Этот минимум, однако, очень неглубок по сравнению с минимумом на кривой $^1\Sigma$, и в масштабе рис. 13 вообще не был бы заметен.

(полный спин $S = \frac{1}{2}$). Что касается элементов промежуточных групп, то они обладают особыми свойствами, о которых речь будет идти ниже, после того как мы изучим валентные свойства элементов главных групп.

Способность атомов соединяться друг с другом связана, таким образом, с их спинами (*В. Гайтлер и Г. Лондон, 1927*). Соединение происходит так, чтобы спины атомов взаимно скомпенсировались. В качестве количественной характеристики способности атомов к взаимному соединению удобно пользоваться целым числом — удвоенным спином атома. Это число совпадает с химической валентностью атома. При этом надо иметь в виду, что один и тот же атом может обладать различной валентностью в зависимости от того, в каком состоянии он находится.

Рассмотрим с этой точки зрения элементы главных групп периодической системы. Элементы первой группы (первый столбец в табл. 1, стр. 187 группа щелочных металлов) обладают в нормальном состоянии спином $S = \frac{1}{2}$ и, соответственно, их валентность равна единице. Возбужденное состояние с большим спином может быть получено только за счет возбуждения электрона из заполненной оболочки. Соответственно этому, эти состояния находятся настолько высоко, что возбужденный атом не может образовать устойчивую молекулу.

Атомы элементов второй группы (второй столбец в табл. 1, группа щелочноземельных металлов) обладают в нормальном состоянии спином $S = 0$. Поэтому в нормальном состоянии эти атомы не могут вступать в химические соединения. Однако сравнительно близко к основному состоянию расположено возбужденное, имеющее в незаполненной оболочке конфигурацию sp вместо s^2 и полный спин $S = 1$. Валентность атома в этом состоянии равна 2; это и есть основная валентность элементов второй группы.

Элементы третьей группы обладают в нормальном состоянии электронной конфигурацией s^2p со спином $S = \frac{1}{2}$. Однако путем возбуждения электрона из заполненной s -оболочки получается возбужденное состояние с конфигурацией sp^2 и спином $S = \frac{3}{2}$, расположенное близко к нормальному. Соответственно этому, элементы этой группы ведут себя и как одновалентные, и как трехвалентные. При этом первые элементы этой группы (B, Al) ведут себя только как трехвалентные. Наклонность к проявлению

валентности 1 растет с увеличением атомного номера, и Tl ведет себя уже в равной степени как одновалентный и трехвалентный элемент (например, в соединениях $TlCl$ и $TlCl_3$). Это связано с тем, что в первых элементах группы энергетическое преимущество большей энергии связи в соединениях трехвалентного элемента (по сравнению с соединениями одновалентного элемента) преобладает над энергией возбуждения атома.

В элементах четвертой группы основное состояние имеет конфигурацию s^2p^2 со спином 1, а близкое к нему возбужденное состояние — конфигурацию sp^3 со спином 2. Этим состояниям соответствуют валентности 2 и 4. Как и в третьей группе, первые элементы четвертой группы (C, Si) проявляют в основном высшую валентность (исключение представляет, например, соединение CO), а склонность к проявлению низшей валентности возрастает с увеличением атомного номера.

В атомах элементов пятой группы основное состояние обладает конфигурацией s^2p^3 и спином $S=3/2$, так что соответствующая валентность равна трем. Возбужденное состояние с большим спином может получиться только путем перехода одного из электронов в оболочку со следующим значением главного квантового числа. Ближайшее такое состояние имеет конфигурацию sp^3s' и спин $S=5/2$ (посредством s' мы условно обозначаем здесь s -состояние электрона с главным квантовым числом, на единицу большим, чем в состоянии s). Хотя энергия возбуждения этого состояния сравнительно велика, но все же возбужденный атом может вступить в устойчивое соединение. Соответственно этому элементы пятой группы ведут себя как трех- и пятивалентные (так, азот в NH_3 трехвалентен, а в HNO_3 — пятивалентен).

В шестой группе элементов в основном состоянии (конфигурация s^2p^4) спин равен 1, так что атом двухвалентен. Возбуждение одного из p -электронов приводит к состоянию s^2p^3s' со спином 2, а возбуждение еще одного s -электрона приводит к состоянию $sp^3s'p'$ со спином 3. В обоих возбужденных состояниях атом может вступать в устойчивые молекулы, проявляя соответственно валентности 4 и 6. При этом первый элемент шестой группы (кислород) проявляет только валентность 2, а следующие элементы группы проявляют также и высшие валентности (так, сера в H_2S ,

SO₂, SO₃ соответственно двух-, четырех- и шестивалентна).

В седьмой группе (группа галоидов) в основном состоянии (конфигурация s^2p^5 , спин $S=\frac{1}{2}$) атомы одновалентны. Они могут, однако, вступать в устойчивые соединения и в возбужденных состояниях с конфигурациями s^2p^4s' , $s^2p^3s'p'$, $sp^3s'p'^2$ со спинами, соответственно равными $\frac{3}{2}$, $\frac{5}{2}$, $\frac{7}{2}$, что соответствует валентностям 3, 5, 7. При этом первый элемент группы (F) всегда одновалентен, а следующие элементы проявляют также и высшие валентности (так, хлор в HCl, HClO₂, HClO₃, HClO₄ соответственно одно-, трех-, пяти- и семивалентен).

Наконец, атомы элементов группы благородных газов обладают в основном состоянии полностью заполненными оболочками (так что спин $S=0$), а их энергии возбуждения велики. Соответственно этому валентность равна нулю и эти элементы химически инертны.

При соединении атомов в молекулу заполненные электронные оболочки атомов мало меняются. Распределение же электронной плотности в незаполненных оболочках может существенно измениться. В наиболее резко выраженных случаях так называемой *гетерополярной связи* все валентные электроны переходят от одних атомов к другим, так что можно сказать, что молекула состоит из ионов с зарядами, равными (в единицах e) их валентности. Элементы первой группы электроположительны — в гетерополярных соединениях они отдают электроны, образуя положительные ионы. При переходе к следующим группам электроположительность постепенно падает, переходя в электроотрицательность, в наибольшей степени присущую элементам седьмой группы. По поводу гетерополярности надо, однако, сделать следующее замечание.

Если молекула гетерополярна, то это отнюдь не означает, что при разведении атомов мы непременно получили бы из нее два иона. Так, из молекулы CsF мы действительно получили бы ионы Cs⁺ и F⁻, но молекула NaF дает в пределе нейтральные атомы Na и F (поскольку сродство фтора к электрону больше ионизационного потенциала цезия, но меньше ионизационного потенциала натрия).

В противоположном предельном случае так называемой *гомеополярной связи* атомы в молекуле остаются в среднем

нейтральными. Гомеополлярные молекулы, в противоположность гетерополлярным, не обладают значительным дипольным моментом. Разница между гетеро- и гомеополлярными типами связи чисто количественная, и могут осуществляться все переходные случаи.

Перейдем теперь к элементам промежуточных групп. Элементы групп палладия и платины по характеру своих валентных свойств мало отличаются от элементов главных групп. Разница заключается в том, что благодаря сравнительно глубокому расположению *d*-электронов в атоме они слабее взаимодействуют с другими атомами в молекуле. В результате этого среди соединений этих элементов относительно часто встречаются «ненасыщенные» соединения с молекулами, обладающими отличным от нуля спином (фактически не превышающим $\frac{1}{2}$). Каждый из элементов может проявлять различные валентности, причем они могут отличаться здесь и на единицу, а не только на два, как у элементов главных групп (где изменение валентности связано с возбуждением какого-либо электрона с компенсированным спином, в результате чего освобождаются сразу спины пары электронов).

Элементы группы редких земель характеризуются наличием незаполненной *f*-оболочки. *f*-электроны расположены гораздо глубже *d*-электронов и в связи с этим вовсе не принимают участия в валентности. Таким образом, валентность редкоземельных элементов определяется только *s*- и *p*-электронами незаполненных оболочек ¹⁾. Надо, однако, иметь в виду, что при возбуждении атома *f*-электроны могут переходить в *s*- и *p*-состояния, увеличивая тем самым валентность на единицу. Поэтому и редкоземельные элементы проявляют валентности, отличающиеся на единицу (фактически все они трех- и четырехвалентны).

Элементы группы железа занимают по своим валентным свойствам промежуточное положение между редкоземельными элементами и элементами групп палладия и платины. В их атомах *d*-электроны расположены сравнительно глубоко и в целом ряде соединений вовсе не принимают участия в валентной связи. В этих соединениях, следовательно,

¹⁾ *d*-электроны, имеющиеся в незаполненных оболочках атомов некоторых из редкоземельных элементов, несущественны, так как фактически эти атомы всегда вступают в соединение в таких возбужденных состояниях, в которых *d*-электронов нет.

элементы группы железа ведут себя подобно редкоземельным элементам. Сюда относятся соединения ионного типа (например, FeCl_2 , FeCl_3), в которые атом металла входит в виде простого катиона. Подобно редкоземельным элементам, элементы группы железа в этих соединениях могут проявлять самые различные валентности.

Другим типом соединений элементов группы железа являются так называемые *комплексные* соединения. Они характеризуются тем, что атом промежуточного элемента входит в молекулу не в виде простого иона, а составляет часть сложного, комплексного, иона (например, ион MnO_4^- в KMnO_4 , ион $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ в $\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6$). В таких комплексных ионах атомы расположены ближе друг к другу, чем в простых ионных соединениях, и в них *d*-электроны принимают участие в валентной связи. Соответственно этому в комплексных соединениях элементы группы железа ведут себя подобно элементам групп палладия и платины.

Наконец, необходимо оговорить, что элементы Cu , Ag , Au , отнесенные в § 52 к главным группам, в ряде соединений ведут себя как промежуточные. Эти элементы способны проявлять валентность, превышающую единицу, за счет перехода электронов из *d*-оболочки в близкую по энергии *p*-оболочку (например, у Cu из $3d$ в $4p$). В таких соединениях атомы имеют незаполненную *d*-оболочку и поэтому ведут себя как промежуточные (Cu — как элемент группы железа, а Ag , Au — как элементы группы Pd и Pt).

§ 59. Колебательная и вращательная структура термов двухатомной молекулы

Как уже указывалось в начале этой главы, большая разница в массах ядер и электронов дает возможность разделить задачу об определении энергетических уровней молекулы на две части. Сначала определяются уровни энергии системы электронов при неподвижных ядрах как функции расстояния между последними (электронные термы). Вслед за тем можно рассмотреть движение ядер при заданном электронном состоянии; это сводится к тому, что ядра рассматриваются как частицы, взаимодействующие друг с другом по закону $U_n(r)$, где U_n — соответствующий электронный терм. Движение молекулы складывается из ее поступательного перемещения как целого и из движения ядер

относительно их центра инерции. Поступательное движение не представляет, разумеется, интереса, и мы можем считать центр инерции неподвижным.

Мы ограничимся изучением электронных термов, в которых полный спин молекулы $S=0$ (синглетные термы). Уже этот простейший случай несет в себе все основные качественные черты структуры уровней энергии двухатомных молекул.

Задача об относительном движении двух частиц (ядер), взаимодействие которых $U(r)$ зависит только от их взаимного расстояния r , сводится к задаче о движении одной частицы с массой M (приведенная масса обоих ядер) в центральном поле $U(r)$. Последняя же задача, в свою очередь, сводится к задаче об одномерном движении в поле с эффективной потенциальной энергией, равной сумме U и центробежной энергии (ср. § 29).

При равном нулю спине полный момент импульса молекулы $\mathbf{J}$ складывается из орбитального момента электронов $\mathbf{L}$ и момента вращения ядер; последнему соответствует, следовательно, оператор $\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{L}}$, а оператор центробежной энергии есть

$$\frac{\hbar^2}{2Mr^2} (\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{L}})^2.$$

Эффективная же потенциальная энергия определится как

$$U_J(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} (\overline{\mathbf{J} - \mathbf{L}})^2, \quad (59,1)$$

где усреднение производится по состоянию молекулы при фиксированном значении r .

Произведем усреднение для состояния, в котором молекула обладает определенным значением квадрата полного момента $\mathbf{J}^2 = J(J+1)$ и определенным значением проекции электронного момента на ось молекулы (ось z): $L_z = \Lambda$. Раскрыв скобки в (59,1), имеем

$$U_J(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} J(J+1) + \frac{\hbar^2}{Mr^2} \overline{\mathbf{L}\mathbf{J}} + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} \overline{\mathbf{L}^2}. \quad (59,2)$$

Последний член зависит только от электронного состояния и не содержит вовсе квантового числа J ; этот член можно просто включить в энергию $U(r)$. Покажем, что то же самое относится и к предпоследнему члену.

Вспомним, что если проекция момента на какую-либо ось имеет определенное значение, то вдоль этой же оси направлено и среднее значение всего вектора момента (см. замечание в конце § 15). Обозначив через $\mathbf{n}$ единичный вектор вдоль оси z , имеем поэтому $\bar{\mathbf{L}} = \Lambda \mathbf{n}$. Далее, в классической механике момент вращения системы из двух частиц (ядер) равен $[\mathbf{r}\mathbf{p}]$, где $\mathbf{r} = r\mathbf{n}$ — радиус-вектор между обоими частицами, а $\mathbf{p}$ — импульс их относительного движения; эта величина перпендикулярна направлению $\mathbf{n}$. В квантовой механике то же самое будет относиться к оператору момента вращения ядер: $(\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{L}})\mathbf{n} = 0$ или $\hat{\mathbf{J}}\mathbf{n} = \hat{\mathbf{L}}\mathbf{n}$. Из равенства операторов следует, конечно, и равенство их собственных значений, а поскольку $nL = L_z = \Lambda$, то и

$$J_z = \Lambda. \quad (59,3)$$

Таким образом, в-предпоследнем члене в (59,2) величина $\bar{\mathbf{L}}\mathbf{J} = nJ\Lambda = \Lambda^2$, т. е. не зависит от J . С новым определением функции $U(r)$ можно написать окончательно эффективную потенциальную энергию в виде

$$U_J(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} J(J+1). \quad (59,4)$$

Решая одномерное уравнение Шредингера с этой потенциальной энергией, мы получим ряд энергетических уровней. Условимся нумеровать эти уровни (при каждом данном J) в порядке их возрастания номером v , пробегающим значения $v=0, 1, 2, \dots$; $v=0$ соответствует наиболее низкому уровню. Таким образом, движение ядер приводит к расщеплению каждого электронного терма на ряд уровней, характеризующихся значениями двух квантовых чисел J и v .

Зависимость уровней от квантовых чисел не может быть полностью вычислена в общем виде. Такое вычисление возможно лишь для сравнительно слабо возбужденных уровней, лежащих не слишком высоко над основным уровнем. Этим уровням соответствуют небольшие значения квантовых чисел J и v . Именно с такими уровнями обычно приходится иметь дело при изучении молекулярных спектров и потому они представляют особый интерес.

Движение ядер в слабо возбужденных состояниях можно характеризовать как малые колебания относительно

положения равновесия. Соответственно этому можно разложить $U(r)$ в ряд по степеням разности $\xi = r - r_e$, где r_e — значение r , при котором $U(r)$ имеет минимум. Поскольку $U'(r_e) = 0$, то, с точностью до членов второго порядка, имеем

$$U(r) = U_e + \frac{M\omega^2}{2} \xi^2,$$

где $U_e = U(r_e)$, а $\omega = \sqrt{U''(r_e)/M}$ — частота колебаний (см. I § 17). Во втором же члене в (59,4) — центробежной энергии — достаточно положить $r = r_e$. Таким образом, имеем

$$U_J(r) = U_e + BJ(J+1) + \frac{M\omega^2}{2} \xi^2, \quad (59,5)$$

где $B = \hbar^2/2Mr_e^2 = \hbar^2/2I$ — так называемая *ротационная постоянная* ($I = Mr_e^2$ — момент инерции молекулы).

Первые два члена в (59,5) — постоянные, а третий соответствует одномерному гармоническому осциллятору. Поэтому можно сразу написать для искоемых уровней энергии

$$E = U_e + BJ(J+1) + \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right). \quad (59,6)$$

Таким образом, в рассматриваемом приближении энергетические уровни складываются из трех независимых частей:

$$E = E^{el} + E^r + E^v. \quad (59,7)$$

Первый член ($E^{el} = U_e$) — электронная энергия (включающая энергию кулонового взаимодействия ядер). Второй член,

$$E^r = BJ(J+1), \quad (59,8)$$

— *вращательная* (или ротационная) энергия, связанная с вращением молекулы¹⁾. Отметим, что поскольку проекция момента не может превышать его величины J , то из (59,3) следует, что квантовое число J может пробегать лишь значения

$$J = \Lambda, \Lambda + 1, \Lambda + 2, \dots \quad (59,9)$$

¹⁾ Вращающуюся систему из двух жестко связанных друг с другом частиц часто называют *ротатором*. Формула (59,8) определяет квантовые уровни энергии ротатора.

Наконец, третий член в (59,7),

$$E^v = \hbar\omega(v + 1/2) \quad (59,10)$$

— энергия колебаний ядер внутри молекулы. Число v нумерует, в соответствии с принятым определением, уровни с данным J в порядке их возрастания; это число называют *колебательным* (или *вибрационным*) квантовым числом.

При данной форме кривой потенциальной энергии $U(r)$ частота ω обратно пропорциональна $\sqrt{M}$. Поэтому и интервалы ΔE^v между колебательными уровнями пропорциональны $1/\sqrt{M}$. Интервалы ΔE^r между вращательными уровнями содержат в знаменателе момент инерции I , т. е. пропорциональны $1/M$. Интервалы же ΔE^{el} между электронными уровнями, как и сами эти уровни, не содержат M вовсе. Поскольку m/M (m — масса электрона) есть малый параметр теории двухатомных молекул, то мы видим, что

$$\Delta E^{el} \gg \Delta E^v \gg \Delta E^r. \quad (59,11)$$

Эти неравенства отражают своеобразный характер распределения уровней молекулы. Колебательное движение ядер расщепляет электронные термы на сравнительно близко расположенные друг от друга уровни. Эти уровни, в свою очередь, испытывают еще более тонкое расщепление под влиянием вращательного движения молекулы.

Приведем для иллюстрации значения величин U_e , $\hbar\omega$ и B (в электронвольтах) для нескольких типичных молекул:

	H ₂	N ₂	O ₂
$-U_e$	4,7	7,5	5,2
$\hbar\omega$	0,54	0,29	0,20
$10^3 B$	7,6	0,25	0,18

§ 60. Параводород и ортоводород

В § 56 мы уже рассмотрели некоторые свойства симметрии состояний двухатомной молекулы. Эти свойства относились к электронным термам, т. е. характеризовали поведение волновой функции электронов при преобразованиях,

не затрагивающих координат ядер. После включения в понятие состояния молекулы также и движения ядер (колебания и вращение) появляются и новые свойства симметрии, относящиеся уже к молекуле в целом. Мы остановимся здесь на интересном явлении, связанном с симметрией состояний двухатомных молекул, состоящих из одинаковых атомов (подразумевается, что атомы принадлежат не только одному и тому же элементу, но и одному его изотопу, так что оба ядра тождественны).

Для определенности будем говорить о молекуле водорода в ее основном электронном состоянии (синглетное состояние $^1\Sigma_g^+$).

Гамильтониан молекулы из одинаковых атомов инвариантен по отношению к взаимной перестановке ядер. В связи с этим появляется новое свойство симметрии состояний: волновая функция молекулы может быть симметричной или антисимметричной по отношению к изменению знака радиус-вектора $\mathbf{r}$, направленного от одного ядра к другому.

Волновая функция молекулы представляет собой произведение электронной и ядерной волновой функции. Согласно § 59 последняя формально совпадает с волновой функцией движения одной частицы с орбитальным моментом J в центрально-симметричном поле $U(r)$. С этой точки зрения преобразование $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ представляет собой инверсию координат относительно центра поля, и согласно (19,5) такое преобразование умножает волновую функцию на $(-1)^J$. Электронная волновая функция тоже зависит от координат ядер — как от параметров. Для основного электронного терма молекулы эта функция симметрична по отношению к перестановке ядер ¹⁾. Поэтому множитель $(-1)^J$ определяет симметричность или антисимметричность не только ядерной части, но и всей волновой функции молекулы в целом.

¹⁾ Это свойство соответствует указанному в § 56 общему эмпирическому правилу, согласно которому у большинства двухатомных молекул нормальное электронное состояние обладает полной симметрией. Можно показать также и прямыми рассуждениями, что симметричность по отношению к перестановке ядер автоматически следует из других свойств состояния $^1\Sigma_g^+$ — симметричности по отношению к отражению в плоскости, проходящей через ось молекулы, и по отношению к изменению знака координат всех электронов при неизменных координатах ядер.

В § 46 была установлена общая теорема о том, что для системы из двух одинаковых частиц со спином $i = \frac{1}{2}$ симметричные (по координатам частиц) состояния могут осуществляться только при равном нулю суммарном спине частиц I , а антисимметричные состояния — только при $I=0$. Применим это правило к двум ядрам молекулы водорода (протоны со спином $\frac{1}{2}$). Мы придем тогда к результату, что при параллельных спинах ядер ($I=1$) молекула в своем нормальном электронном состоянии может обладать лишь нечетными значениями вращательного момента J , а при антипараллельных спинах ядер ($I=0$) лишь четными J . Это — замечательный пример квантовомеханического обменного эффекта: ядерные спины оказывают сильное косвенное влияние на молекулярные термы, хотя их непосредственное влияние на величину энергии (сверхтонкая структура термов) совершенно ничтожно.

Ввиду чрезвычайной малости магнитных моментов протонов, а потому и слабости взаимодействия их спинов с электронами в молекуле, вероятность изменения I очень мала даже при столкновениях молекул. Поэтому молекулы с $I=1$ и с $I=0$ ведут себя практически как различные модификации вещества; их называют соответственно молекулами *ортоводорода* и *параводорода*.

Основной уровень молекулы параводорода отвечает вращательному квантовому числу $J=0$. Для молекулы же ортоводорода, у которой возможны лишь нечетные значения J , основным является уровень с $J=1$, лежащий выше основного уровня ортоводорода.

§ 61. Ван-дер-ваальсовы силы

Рассмотрим два атома, находящихся на большом (по сравнению с их собственными размерами) расстоянии друг от друга, и определим энергию их взаимодействия. Другими словами, речь идет об определении вида электронных термов $U_n(r)$ при больших расстояниях между ядрами.

Для решения этой задачи применим теорию возмущений, рассматривая два изолированных атома как невозмущенную систему, а потенциальную энергию их электрического взаимодействия как оператор возмущения. Как известно (см. I § 64), электрическое взаимодействие двух систем зарядов, находящихся на большом расстоянии r друг от

друга, можно разложить по степеням $1/r$, причем последовательные члены этого разложения соответствуют взаимодействию полных зарядов, дипольных, квадрупольных и т. д. моментов обеих систем. У нейтральных атомов полные заряды равны нулю. Разложение начинается здесь с диполь-дипольного взаимодействия ($\sim 1/r^3$), за ним следуют диполь-квадрупольные члены ($\sim 1/r^4$), квадруполь-квадрупольные члены ($\sim 1/r^5$) и т. д.

Предположим сначала, что оба атома находятся в S -состояниях. Легко видеть, что тогда в первом приближении теории возмущений эффект взаимодействия атомов отсутствует. Действительно, в первом приближении энергия взаимодействия определяется как диагональный матричный элемент оператора возмущения, вычисленный по невозмущенным волновым функциям системы (которые сами выражаются произведениями волновых функций двух атомов). Но в S -состояниях диагональные матричные элементы, т. е. средние значения дипольного, квадрупольного и т. д. моментов атомов равны нулю, как это следует непосредственно из сферической симметрии распределения средней плотности зарядов в атомах.

Во втором приближении достаточно ограничиться дипольным взаимодействием в операторе возмущения, как наиболее медленно убывающем с увеличением r , т. е. членом

$$V = \frac{-\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 + 3(\mathbf{d}_1 \mathbf{n})(\mathbf{d}_2 \mathbf{n})}{r^3} \quad (61,1)$$

($\mathbf{n}$ — единичный вектор в направлении между обоими атомами). Поскольку недиагональные матричные элементы дипольного момента, вообще говоря, отличны от нуля, то во втором приближении теории возмущений мы получаем отличный от нуля результат, который, будучи квадратичным по V , пропорционален $1/r^6$. Поправка второго приближения к наиболее низкому собственному значению всегда отрицательна (§ 32). Поэтому мы получим для энергии взаимодействия атомов, находящихся в нормальных состояниях, выражение вида

$$U(r) = -\frac{\text{const}}{r^6}, \quad (61,2)$$

где const — положительная постоянная (Ф. Лондон, 1928).

Таким образом, два атома в нормальных S -состояниях, находящиеся на большом расстоянии друг от друга, притягиваются с силой $(-dU/dr)$, обратно пропорциональной седьмой степени расстояния. Силы притяжения между атомами на больших расстояниях называют обычно *ван-дер-ваальсовыми силами*. Эти силы приводят к появлению ямы и на кривых потенциальной энергии электронных термов атомов, не образующих устойчивой молекулы. Эти ямы, однако, очень пологи (их глубина измеряется всего десятками или даже сотыми долями электронвольта), и они расположены на расстояниях в несколько раз больших, чем меж-атомные расстояния в устойчивых молекулах.

Важность формулы (61,2) связана также и с тем, что такому закону следуют силы взаимодействия на больших расстояниях между атомами и в любых (не обязательно S) нормальных состояниях, если только усреднить это взаимодействие по всем возможным ориентациям атомов; именно такая постановка вопроса соответствует, например, задаче о взаимодействии атомов в газе ¹⁾.

Действительно, хотя средний дипольный момент равен нулю во всяком стационарном состоянии, но уже среднее значение квадрупольного момента для атома с отличным от нуля моментом J может быть отлично от нуля (§ 54). Поэтому квадруполь-квадрупольный член в операторе взаимодействия сможет дать отличный от нуля результат уже в первом приближении теории возмущений. Но средние значения квадрупольного момента (как и мультипольных моментов более высоких порядков) зависят от ориентации его момента J и в силу соображений симметрии обратятся в нуль при усреднении по этим ориентациям.

З а д а ч а

Для двух одинаковых атомов, находящихся в S -состояниях, получить формулу, определяющую ван-дер-ваальсовы силы по матричным элементам их дипольных моментов.

¹⁾ Подчеркнем, однако, что этот закон, полученный на основании нерелятивистской теории, справедлив лишь до тех пор, пока несущественны эффекты запаздывания электромагнитных взаимодействий. Для этого расстояния r между атомами должно быть мало по сравнению с c/ω_{0n} , где ω_{0n} — частоты переходов между основным и возбужденными состояниями атома.

Решение. Ответ получается из общей формулы возмущений (32,10), примененной к оператору (61,1). Ввиду изотропии атомов в S -состоянии заранее очевидно, что при суммировании по всем промежуточным состояниям квадраты матричных элементов трех компонент каждого из векторов $\mathbf{d}_1$ и $\mathbf{d}_2$ дают одинаковые вклады, а члены, содержащие произведения различных компонент, обращаются в нуль. В результате получим

$$U(r) = -\frac{6}{r^3} \sum_{n, n'} \frac{(d_z)_{0n}^2 (d_z)_{0n'}^2}{2E_0 - E_n - E_{n'}},$$

где E_0 , E_n — невозмущенные значения энергии основного и возбужденных состояний атома.

Г л а в а IX

УПРУГИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ

§ 62. Амплитуда рассеяния

В классической механике столкновения двух частиц полностью определяются их скоростями и «прицельным расстоянием» (т. е. расстоянием, на котором они прошли бы друг мимо друга при отсутствии взаимодействия). В квантовой механике меняется сама постановка вопроса, так как при движении с определенными скоростями понятие траектории, а с нею и «прицельного расстояния» теряет смысл. Целью теории является здесь лишь вычисление вероятности того, что в результате столкновения частицы отклонятся (или, как говорят, *рассеются*) на тот или иной угол. Мы говорим здесь о так называемых *упругих* столкновениях, при которых не происходит никаких превращений частиц или (если это частицы сложные) не меняется их внутреннее состояние.

Задача об упругом столкновении, как и всякая задача двух тел, сводится к задаче о рассеянии одной частицы с приведенной массой в поле $U(r)$ неподвижного силового центра ¹⁾. Сведение осуществляется переходом к системе координат, в которой покоится центр инерции обеих частиц. Угол рассеяния в этой системе обозначим посредством θ . Он связан простыми формулами с углами ϑ_1 и ϑ_2 отклонения обеих частиц в «лабораторной» системе координат, в которой одна из частиц (вторая) до столкновения

¹⁾ Мы пренебрегаем здесь спин-орбитальным взаимодействием частиц (если они обладают спином). Предполагая поле центрально-симметричным, мы тем самым исключаем из рассмотрения также и такие процессы, как, например, рассеяние электронов на молекулах.

покоилась:

$$\operatorname{tg} \vartheta_1 = \frac{m_2 \sin \theta}{m_1 + m_2 \cos \theta}, \quad \vartheta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}, \quad (62,1)$$

где m_1, m_2 — массы частиц (см. I § 14). В частности, если массы обеих частиц одинаковы ($m_1 = m_2$), то получается просто

$$\vartheta_1 = \frac{\theta}{2}, \quad \vartheta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}; \quad (62,2)$$

сумма $\vartheta_1 + \vartheta_2 = \pi/2$, т. е. частицы разлетаются под прямым углом.

Ниже в этой главе мы пользуемся везде (где противное не оговорено особо) системой координат, связанной с центром инерции, а под m подразумевается приведенная масса сталкивающихся частиц.

Свободная частица, движущаяся в положительном направлении оси z , описывается плоской волной, которую мы напомним в виде $\psi = e^{ikz}$, что соответствует плотности потока, равной скорости частиц v (ср. с нормировкой на единичный поток в (21,6)). Рассеянные частицы должны описываться вдали от центра расходящейся сферической волной вида $f(\theta) e^{ikr}/r$, где $f(\theta)$ — некоторая функция угла рассеяния θ (угол между осью z и направлением рассеянной частицы)¹⁾. Таким образом, решение уравнения Шредингера, описывающее процесс рассеяния в поле $U(r)$, должно иметь на больших расстояниях асимптотический вид

$$\psi \approx e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}. \quad (62,3)$$

Функцию $f(\theta)$ называют *амплитудой рассеяния*.

Вероятность рассеянной частице пройти в единицу времени через элемент поверхности $dS = r^2 d\Omega$ ($d\Omega$ — элемент телесного угла) равна $vr^{-2} |f|^2 dS = v |f|^2 d\Omega$ ²⁾. Ее отношение

¹⁾ Расходящаяся сферическая волна содержит экспоненциальный множитель e^{ikr} (а сходящаяся к центру волна — соответственно множитель e^{-ikr}) вместо тригонометрического множителя в рассмотренных в § 30 «стоячих» сферических волнах.

²⁾ В этом рассуждении молчаливо подразумевается, что падающий пучок частиц ограничен широкой (во избежание дифракционных эффектов), но конечной диафрагмой, как это и имеет место в реальных экспериментах по рассеянию. По этой причине нет интерференции между обоими членами в выражении (62,3); квадрат $|\psi|^2$ берется в точках, в которых отсутствует падающая волна.

к плотности потока в падающей волне равно

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega. \quad (62,4)$$

Эта величина имеет размерность площади и называется *эффективным сечением* (или просто *сечением*) рассеяния в телесный угол $d\Omega$. Положив $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$, получим сечение рассеяния в интервале углов между θ и $\theta + d\theta$:

$$d\sigma = 2\pi \sin\theta |f(\theta)|^2 d\theta. \quad (62,5)$$

Решение уравнения Шредингера, описывающее рассеяние в центральном поле, аксиально-симметрично вокруг оси z . Общий вид такого решения может быть представлен в виде разложения

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos\theta) R_{kl}(r), \quad (62,6)$$

где R_{kl} — радиальные функции, удовлетворяющие уравнению (29,8) (с энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$). Асимптотический вид этих функций на больших расстояниях — стоячие волны (30,10). Покажем, каким образом можно выразить амплитуду рассеяния через фазовые сдвиги этих функций δ_l .

Подставив (30,10) в (62,6), напомним общий асимптотический вид волновой функции в форме

$$\begin{aligned} \psi &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) = \\ &= \frac{i}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l \left\{ \exp\left[-i\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)\right] - \right. \\ &\quad \left. - \exp\left[i\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)\right] \right\}. \end{aligned}$$

Коэффициенты A_l должны быть выбраны так, чтобы эта функция имела вид (62,3). Для этого воспользуемся полученным в § 30 разложением плоской волны по сферическим. При больших r имеем, согласно (30,16),

$$\begin{aligned} e^{ikz} &\approx \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l \left\{ \exp\left[-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right] - \right. \\ &\quad \left. - \exp\left[i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right] \right\}. \end{aligned}$$

Разность $\psi - e^{ikz}$ должна представлять собой расходящуюся волну, т. е. из нее должны выпасть все члены, содержащие e^{-ikr} . Для этого надо положить

$$A_l = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2l+1) i^l e^{i\delta_l}.$$

Таким образом,

$$\psi \approx \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) [(-1)^l e^{-ikr} - e^{2i\delta_l} e^{ikr}]. \quad (62,7)$$

Для коэффициента же при e^{ikr}/r в разности $\psi - e^{ikz}$ получим тогда

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta). \quad (62,8)$$

Эта формула решает задачу о выражении амплитуды рассеяния через фазы δ_l (Г. Факсен, И. Хольтсмарк, 1927). О каждом из членов суммы говорят как о *парциальной амплитуде* рассеяния частиц с орбитальным моментом l .

Интегрирование $d\sigma$ по всем углам дает полное сечение рассеяния σ , представляющее собой отношение полной вероятности рассеяния частицы (в единицу времени) к плотности потока. Подставим (62,8) в интеграл

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta.$$

Ввиду взаимной ортогональности различных полиномов $P_l(\cos \theta)$, в интеграле остаются лишь квадраты каждого из членов суммы (62,8), и с учетом известного значения нормировочного интеграла (30,13) получим

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (62,9)$$

§ 63. Условие квазиклассичности рассеяния

Предельный переход от полученных в предыдущем параграфе точных квантовомеханических формул теории рассеяния к классическим формулам довольно громоздок и мы не будем производить его здесь. Ограничимся лишь

некоторыми замечаниями об условиях, допускающих такой переход.

Для того чтобы можно было говорить о классическом рассеянии на угол θ при пролетании частицы на прицельном расстоянии ρ , необходимо, чтобы квантовомеханические неопределенности в значениях того и другого были относительно малы: $\Delta\rho \ll \rho$, $\Delta\theta \ll \theta$. Неопределенность угла рассеяния имеет порядок величины $\Delta\theta \sim \Delta p / p$, где p — импульс частицы, а Δp — неопределенность его поперечной составляющей. Так как $\Delta p \sim \hbar / \Delta\rho \gg \hbar / \rho$, то $\Delta\theta \gg \hbar / \rho p$, а потому во всяком случае и

$$\theta \gg \frac{\hbar}{\rho m v}. \quad (63,1)$$

Заменяя момент импульса mvr на $\hbar l$, получим $\theta \gg 1$, откуда видно, что заведомо должно быть $\theta \gg 1$, в соответствии с общим правилом, что квазиклассическому случаю соответствуют большие значения квантовых чисел (§ 27).

Классический угол отклонения частицы можно оценить как отношение поперечного приращения импульса Δp за «время столкновения» $\tau \sim \rho/v$ к первоначальному импульсу mv . Сила, действующая в поле $U(r)$ на частицу на расстоянии ρ , есть $F = -dU(\rho)/d\rho$; поэтому $\Delta p \sim F\rho/v$, так что $\theta \sim \rho F/mv^2$. Эта оценка справедлива строго, лишь если угол $\theta \ll 1$, но по порядку величины ее можно продлить и до $\theta \sim 1$. Подставив это выражение в (63,1), получим условие квазиклассичности рассеяния в виде

$$F\rho^2 \gg \hbar v. \quad (63,2)$$

Если поле $U(r)$ убывает быстрее, чем $1/r$, то условие (63,2) во всяком случае перестает выполняться при достаточно больших ρ . Но большим ρ соответствуют малые θ ; таким образом, рассеяние на достаточно малые углы во всяком случае не будет классическим. Квантовый характер рассеяния на малые углы является, в частности, причиной того, что полное сечение рассеяния может оказаться конечным. Напомним в этой связи, что в классической механике во всяком поле, обращающемся в нуль только при $r \rightarrow \infty$ (т. е. не обрывающемся резко уже на конечном расстоянии), частица, проходящая на любом большом, но конечном, прицельном расстоянии все же испытывает отклонение на некоторый малый, но отличный от нуля угол;

поэтому полное сечение всегда оказывается бесконечным. Как это ясно из сказанного выше, в квантовой механике такое рассуждение неприменимо уже потому, что понятие рассеяния теряет смысл, когда угол рассеяния становится меньше квантовой неопределенности направления движения частицы.

§ 64. Дискретные уровни энергии как полюсы амплитуды рассеяния

Существует определенная связь между законом рассеяния частиц (с положительной энергией E) в заданном поле и дискретным спектром отрицательных уровней энергии в том же поле (если таковые имеются).

Для упрощения записи формул будем говорить о движении частиц с орбитальным моментом $l=0$. Асимптотическое выражение волновой функции с положительной энергией вдали от центра поля запишем в виде суммы сходящейся и расходящейся сферических волн:

$$\psi = \frac{1}{r} \{a(k)e^{ikr} + b(k)e^{-ikr}\}. \quad (64,1)$$

Коэффициенты $a(k)$ и $b(k)$ — некоторые функции k , которые могли бы быть определены лишь путем решения уравнения Шредингера на малых расстояниях с учетом конечности волновой функции при $r=0$. При этом обе функции не независимы, а связаны друг с другом простыми соотношениями. Одно из них следует непосредственно из того, что функция ψ , как волновая функция невырожденного состояния, должна быть вещественной:

$$b(k) = a^*(k). \quad (64,2)$$

Если теперь рассматривать формальным образом произвольные, в том числе и комплексные значения k , то $a(k)$ и $b(k)$ будут функциями комплексной переменной, по-прежнему связанными равенством (64,2), а также равенством

$$a(-k) = b(k), \quad (64,3)$$

вытекающим из самого определения a и b в выражении (64,1) (замена k на $-k$ меняет роли коэффициентов a и b). Функция ψ с комплексным k , являясь аналитическим про-

должением решения уравнения Шредингера с вещественным k , по-прежнему будет решением того же уравнения, конечным в начале координат. Она не будет уже, однако, удовлетворять условию конечности во всем пространстве: при $r \rightarrow \infty$ первый или второй член в (64,1) (смотря по знаку мнимой части k) обращается в бесконечность.

В частности, при чисто мнимых значениях k выражение (64,1) определяет асимптотический вид решения уравнения Шредингера с отрицательной энергией E . Но для того чтобы это решение соответствовало стационарному состоянию дискретного спектра, функция ψ должна оставаться конечной при $r \rightarrow \infty$. Каждому отрицательному значению E соответствует пара чисто мнимых значений $k = \pm i \sqrt{2m|E|/\hbar}$. При верхнем знаке не удовлетворяет условию конечности при $r \rightarrow \infty$ второй член в (64,1); поэтому для значения E , отвечающего дискретному уровню энергии, должно быть

$$b(i|k|) = 0 \quad (64,4)$$

(аналогичным образом, при $k = -i|k|$ должна обращаться в нуль функция $a(k)$).

С другой стороны, сравнив (64,1) с асимптотическим выражением волновой функции частицы с энергией $E > 0$, написанной в виде (30,10),

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2ir} (e^{i(kr+\delta_0)} - e^{-i(kr+\delta_0)}),$$

мы видим, что отношение a/b связано с фазой δ_0 соотношением

$$e^{2i\delta_0(k)} = \frac{a(k)}{b(k)}. \quad (64,5)$$

Это выражение имеет полюс в точке, где $b(k)$ обращается в нуль. Вспомнив теперь, что парциальная амплитуда рассеяния есть

$$f_0 = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1),$$

мы приходим к выводу, что эта амплитуда, как аналитическая функция комплексной переменной k , имеет полюсы в верхней полуплоскости этой переменной при мнимых

значениях k , отвечающих уровням энергии связанных s -состояний частицы в поле.

Аналогичная связь существует между уровнями энергии связанных состояний с $l \neq 0$ и полюсами соответствующих парциальных амплитуд рассеяния.

§ 65. Рассеяние медленных частиц

Рассмотрим свойства упругого рассеяния в предельном случае малых скоростей рассеиваемых частиц. Именно, скорость предполагается настолько малой, что де-бройлевская длина волны частицы велика по сравнению с радиусом действия рассеивающего поля a ¹⁾, а ее энергия мала по сравнению с величиной поля внутри этого радиуса: $ak \ll 1$ и $k^2 \hbar^2 / 2m \ll |U|$.

Вероятность нахождения частицы вблизи центра поля (на расстояниях, малых по сравнению с ее длиной волны) быстро падает с увеличением орбитального момента l (ср. конец § 29). Поэтому основную роль в рассеянии медленных частиц играет рассеяние с $l=0$ (s -рассеяние). Выяснение свойств рассеяния в этом случае требует определения предельного закона зависимости фазы δ_0 от волнового вектора k при малых значениях последнего.

Волновая функция s -состояния зависит только от r . При $r \ll a$ (в радиусе действия поля) в точном уравнении Шредингера

$$\Delta \psi + k^2 \psi = \frac{2m}{\hbar^2} U(r) \psi \quad (65,1)$$

можно пренебречь только членом с k^2 :

$$\Delta \psi \equiv \frac{1}{r} (r\psi)' = \frac{2m}{\hbar^2} U(r) \psi \quad (r \ll a) \quad (65,2)$$

(где штрих означает дифференцирование по r). В области же больших расстояний, $a \ll r \ll 1/k$, можно опустить также и член с $U(r)$, так что остается

$$(r\psi)' = 0. \quad (65,3)$$

¹⁾ Под a понимаются линейные размеры области пространства, в которой поле U существенно отличается от нуля. Так, при рассеянии нейтронов на ядрах роль параметра a играет радиус ядра, при рассеянии электронов на нейтральном атоме — атомный радиус.

Общее решение этого уравнения есть

$$\psi = c_1 + \frac{c_2}{r} \quad \left(a \ll r \ll \frac{1}{k} \right). \quad (65,4)$$

Значения вещественных постоянных c_1 , c_2 могут быть, в принципе, определены лишь путем решения уравнения (65,2) с конкретной функцией $U(r)$.

На еще больших расстояниях, при $r \gg 1/k$, в уравнении (65,1) может быть опущен член с $U(r)$, но нельзя пренебречь членом с k^2 , так что имеем

$$\frac{1}{r} (r\psi)'' + k^2 \psi = 0,$$

т. е. уравнение свободного движения. Решение этого уравнения:

$$\psi = \frac{c_1}{k} \frac{\sin kr}{r} + c_2 \frac{\cos kr}{r} \quad \left(r \gg \frac{1}{k} \right). \quad (65,5)$$

Коэффициенты в нем выбраны таким образом, чтобы при $kr \ll 1$ это решение переходило в (65,4); тем самым достигается «сшивание» решений в областях $kr \ll 1$ и $kr \sim 1$.

Представив сумму (65,5) в виде

$$\psi = \frac{c_1}{kr} \sin(kr + \delta_0),$$

будем иметь для фазы δ_0 :

$$\operatorname{tg} \delta_0 \approx \delta_0 = \frac{c_2}{c_1} k; \quad (65,6)$$

ввиду малости k фаза δ_0 оказывается тоже малой. Наконец, для амплитуды рассеяния находим, сохранив в сумме (62,8) лишь первый член,

$$f = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1) \approx \frac{\delta_0}{k} = \frac{c_2}{c_1}. \quad (65,7)$$

Таким образом, амплитуда рассеяния оказывается постоянной величиной, не зависящей ни от угла рассеяния, ни от скорости частиц. Другими словами, рассеяние медленных частиц изотропно по всем направлениям, а его сечение $\sigma = 4\pi (c_2/c_1)^2$ не зависит от энергии ¹⁾.

¹⁾ В изложенных рассуждениях молчаливо подразумевалось, что поле $U(r)$ достаточно быстро убывает на больших расстояниях ($r \gg a$). Легко выяснить, какова именно должна быть требуемая быстрота убы-

Задачи

1. Определить амплитуду рассеяния медленных частиц сферической потенциальной ямы глубины U_0 и радиуса a : $U(r) = -U_0$ при $r < a$, $U = 0$ при $r > a$.

Решение. Волновой вектор частиц предполагается удовлетворяющим условиям $ka \ll 1$ и $k \ll \kappa$, где $\kappa = \sqrt{2mU_0}/\hbar$. Уравнение (65,2) для функции $\chi = r\psi$ принимает вид

$$\chi'' + \kappa^2 \chi = 0$$

при $r < a$. Его решение, удовлетворяющее условию конечности ψ при $r = 0$, есть

$$\chi = A \sin \kappa r, \quad r < a.$$

При $r > a$ функция χ удовлетворяет уравнению $\chi'' + k^2 \chi = 0$, откуда

$$\chi = B \sin (kr + \delta_0), \quad r > a.$$

Условие непрерывности χ'/χ при $r = a$ дает

$$\kappa \operatorname{ctg} \kappa a = k \operatorname{ctg} (ka + \delta_0) \approx \frac{k}{ka + \delta_0},$$

откуда определяем δ_0 . В результате для амплитуды рассеяния получим

$$f = \frac{\operatorname{tg} \kappa a - \kappa a}{\kappa}. \quad (1)$$

Если не только $ka \ll 1$, но и $\kappa a \ll 1$ (т. е. $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$), то

$$f = \frac{1}{3} a (\kappa a)^2. \quad (2)$$

Формула (1) неприменима, если U_0 и a таковы, что κa близко к нечетному кратному от $\pi/2$. При таких значениях κa среди дискретного спектра отрицательных уровней энергии в потенциальной яме имеется уровень, близкий к нулю¹⁾, и рассеяние описывается формулами, которые будут получены в следующем параграфе.

2. То же для рассеяния на «потенциальном горбе»: $U(r) = U_0$ при $r < a$, $U = 0$ при $r > a$.

Решение. Переход к этому случаю от случая потенциальной ямы осуществляется заменой $U_0 \rightarrow -U_0$, т. е. $\kappa \rightarrow i\kappa$. Из (1) получается тогда

$$f = \frac{\operatorname{th} \kappa a - \kappa a}{\kappa}$$

вания. При больших r второй член в функции (65,4) мал по сравнению с первым. Для того чтобы его сохранение было тем не менее законным, оставленный в уравнении (65,2) малый член $\sim c_2/r^3$ должен быть все же велик по сравнению с членом $U\psi \sim Uc_1$, опущенным при переходе от (65,2) к (65,3). Отсюда следует, что U должно убывать быстрее чем $1/r^3$.

¹⁾ См. задачу 1 § 30. Полученное там уравнение (1) показывает, что уровень энергии будет $|E| \ll U_0$, если $\sin(a\sqrt{2mU_0}/\hbar) \approx \pm 1$.

(причем по-прежнему $\kappa = \sqrt{2mU_0}/\hbar$). В частности, в предельном случае $\kappa a \gg 1$ (большие значения U_0) имеем

$$j = -a, \quad \sigma = 4\pi a^2.$$

Этот результат соответствует рассеянию на непроницаемой сфере радиуса a ; отметим, что классическая механика дала бы для сечения величину, в четыре раза меньшую ($\sigma = \pi a^2$).

§ 66. Резонансное рассеяние при малых энергиях

Особого рассмотрения требует рассеяние медленных ($\kappa a \ll 1$) частиц в поле притяжения в том случае, когда в дискретном спектре отрицательных уровней энергии имеется s -состояние с энергией, малой по сравнению с величиной поля U в пределах радиуса a его действия. Обозначим этот уровень через $-\epsilon$ ($\epsilon > 0$). Энергия E рассеиваемой частицы, будучи малой величиной, тем самым близка к уровню $-\epsilon$, т. е. находится, как говорят, почти в *резонансе* с ним. Это приводит, как мы увидим, к значительному увеличению сечения рассеяния.

Наличие неглубокого уровня можно учесть в теории рассеяния формальным методом, основанным на следующих замечаниях.

Снова, как и в § 65, рассмотрим уравнение Шредингера в различных областях поля. Точное уравнение, которое запишем для функции $\chi = r\psi$ вместо ψ , есть

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \chi = 0.$$

Во «внутренней» области поля ($r \leq a$) можно пренебречь членом $(2mE/\hbar^2)\chi = k^2\chi$ по сравнению с χ'' :

$$\chi'' - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) \chi = 0, \quad r \sim a. \quad (66,1)$$

Во «внешней» же области ($r \gg a$), напротив, можно пренебречь U :

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \chi = 0, \quad r \gg a. \quad (66,2)$$

Решение уравнения (66,2) должно быть «сшито» при некотором r_1 (таком, что $1/k \gg r_1 \gg a$) с решением уравнения (66,1), удовлетворяющим граничному условию $\chi(0) = 0$; условие сшивания заключается в непрерывности отношения χ'/χ , не зависящего от общего нормировочного множителя волновой функции.

Однако вместо того, чтобы рассматривать движение в области $r \sim a$, мы наложим на решение во внешней области должным образом подобранное граничное условие для χ'/χ при малых r ; поскольку внешнее решение медленно меняется при $r \rightarrow 0$, можно формально отнести это условие к точке $r=0$. Уравнение (66,1) в области $r \sim a$ не содержит E ; поэтому заменяющее его граничное условие тоже не должно зависеть от энергии частицы. Другими словами, оно должно иметь вид

$$\frac{\chi'}{\chi} \Big|_{r \rightarrow 0} = -\kappa, \quad (66,3)$$

где κ — некоторая постоянная. Но раз κ не зависит от E , то это же условие (66,3) должно относиться и к решению уравнения Шредингера для малой отрицательной энергии $E = -\varepsilon$, т. е. к волновой функции соответствующего стационарного состояния частицы. При $E = -\varepsilon$ имеем из (66,2)

$$\chi = \text{const} \cdot e^{-r\sqrt{2m\varepsilon}/\hbar},$$

и подстановка этой функции в (66,3) показывает, что κ есть положительная величина, равная

$$\kappa = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar. \quad (66,4)$$

Применим теперь граничное условие (66,3) к волновой функции свободного движения:

$$\chi = \text{const} \cdot \sin(kr + \delta_0),$$

представляющей собой точное общее решение уравнения (66,2) при $E > 0$. В результате получим для искомой фазы δ_0 :

$$\text{ctg } \delta_0 = -\frac{\kappa}{k} = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{E}}. \quad (66,5)$$

Поскольку энергия E ограничена здесь лишь условием $ka \ll 1$, но не должна быть мала по сравнению с ε , фаза δ_0 , а с нею и амплитуда s -рассеяния, может оказаться не малой величиной. Парциальные же амплитуды рассеяния с $l \neq 0$ остаются по-прежнему малыми. Поэтому полную амплитуду можно по-прежнему считать совпадающей с амплитудой s -рассеяния:

$$f = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1) = \frac{1}{k(\text{ctg } \delta_0 - i)}.$$

Подставив сюда (66,5), получим

$$f = -\frac{1}{\kappa + i\kappa}. \quad (66,6)$$

Отметим, что это выражение имеет полюс при $k = i\kappa$ — в соответствии с полученным в § 64 общим результатом.

Для полного сечения $\sigma = 4\pi |f|^2$ находим

$$\sigma = \frac{4\pi}{\kappa^2 + k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{E + \varepsilon}. \quad (66,7)$$

Таким образом, рассеяние по-прежнему изотропно (амплитуда (66,6) не зависит от направления), но его сечение зависит от энергии и в области резонанса ($E \sim \varepsilon$) оказывается большим по сравнению с квадратом радиуса действия поля a^2 (поскольку $1/k \gg a$). Подчеркнем, что вид формулы (66,7) не зависит от деталей взаимодействия частиц на малых расстояниях между ними и всецело определяется значением резонансного уровня ¹⁾.

Полученная формула имеет несколько более общий характер, чем сделанное при ее выводе предположение. Подвергнем функцию $U(r)$ небольшому изменению; при этом изменится и значение постоянной в граничном условии (66,3). Соответствующим изменением $U(r)$ можно добиться обращения κ в нуль, а затем сделать малой отрицательной величиной. При этом мы получим ту же формулу (66,6) для амплитуды рассеяния и ту же формулу (66,7) для сечения. В последней, однако, величина $\varepsilon = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$ является теперь просто характерной для поля $U(r)$ постоянной, но отнюдь не уровнем энергии в этом поле. В таких случаях говорят, что в поле имеется *виртуальный уровень*, имея в виду, что хотя в действительности никакого близкого к нулю уровня нет, но уже небольшого изменения поля было бы достаточно для того, чтобы такой уровень появился ²⁾.

¹⁾ Формула (66,7) была впервые получена Е. Вигнером (1933); идея изложенного вывода принадлежит Г. Бете и Р. Пайерлсу (1935).

²⁾ В качестве примера укажем, что оба случая резонанса (на истинном и виртуальном уровнях) имеют место для рассеяния нейтронов на протонах. Для взаимодействия нейтрона и протона с параллельными спинами существует истинный уровень с энергией $\varepsilon = 2,23$ Мэв (основное состояние дейтрона). Взаимодействие же нейтрона и протона с антипараллельными спинами характеризуется наличием виртуального уровня $\varepsilon = 0,067$ Мэв.

§ 67. Формула Борна

Сечение рассеяния может быть вычислено в общем виде в очень важном случае — когда рассеивающее поле может рассматриваться (в отношении его воздействия на движение рассеиваемой частицы) как слабое возмущение. К вопросу об условиях применимости такого приближения к теории рассеяния мы вернемся в конце этого параграфа.

Невозмущенное движение частицы, падающей на рассеивающий центр с импульсом $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, описывается плоской волной $\psi^{(0)} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, удовлетворяющей уравнению Шредингера

$$\Delta\psi^{(0)} + k^2\psi^{(0)} = 0.$$

Будем искать решение точного уравнения

$$\Delta\psi + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U\right) \psi = 0$$

в виде $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$, причем малая поправка $\psi^{(1)}$, описывающая рассеянную волну, должна удовлетворять неоднородному (по $\psi^{(1)}$) уравнению

$$\Delta\psi^{(1)} + k^2\psi^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2} \psi^{(0)} = \frac{2m}{\hbar^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (67,1)$$

в котором опущен член второго порядка малости ($\sim \psi^{(1)}U$).

Решение этого уравнения может быть написано непосредственно по аналогии с известным из электродинамики уравнением запаздывающих потенциалов:

$$\Delta\varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -4\pi\rho,$$

где ρ — некоторая функция координат и времени (см. I § 77). Его решение

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{1}{R} \rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c}\right) dV', \quad dV' = dx' dy' dz',$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ — радиус-вектор от элемента объема dV' к «точке наблюдения» $\mathbf{r}$, в которой ищется значение φ . Если зависимость функции ρ от времени дается множителем e^{-ikct} , то, написав

$$\rho = \rho_0(\mathbf{r}) e^{-ikct}, \quad \varphi = \varphi_0(\mathbf{r}) e^{-ikct},$$

будем иметь для φ_0 уравнение

$$\Delta\varphi_0 + k^2\varphi_0 = -4\pi\varphi_0 \quad (67,2)$$

и для его решения

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \int \rho_0(\mathbf{r}') e^{ikR} \frac{dV'}{R}. \quad (67,3)$$

Ввиду очевидной аналогии между уравнениями (67,2) и (67,1) решение последнего может быть представлено в виде

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}' + kR)} \frac{dV'}{R}. \quad (67,4)$$

Легко написать теперь асимптотическое выражение этой функции на больших расстояниях r от рассеивающего центра. При $r \gg r'$ имеем $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{r}'\mathbf{n}'$, где $\mathbf{n}'$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{k}'$; в множителе же $1/R$ в подынтегральном выражении в (67,4) достаточно положить просто $R \approx r$. Тогда получим

$$\psi^{(1)} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{r}'} dV',$$

где $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$ есть волновой вектор частицы после рассеяния. Согласно определению (62,3) коэффициент при e^{ikr}/r в этой функции и дает искомую амплитуду рассеяния; опустив штрих у переменных интегрирования, напомним ее в виде

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV. \quad (67,5)$$

Здесь введен вектор

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad (67,6)$$

по абсолютной величине равный

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}, \quad (67,7)$$

где θ — угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$, т. е. угол рассеяния. Мы видим, что амплитуда рассеяния с изменением импульса частицы на $\hbar\mathbf{q}$ определяется соответствующей компонентой Фурье поля $U(\mathbf{r})$. Сечение же рассеяния в элемент телесного угла $d\theta'$ равно

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int U e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV \right|^2 d\theta'. \quad (67,8)$$

Эта формула была впервые получена *Максом Борном* (1926); соответствующее приближение в теории столкновений называют *борновским приближением*.

Формула (67,8) может быть получена также и другим способом, прямо из общей формулы теории возмущений (35,6), определяющей вероятность перехода между двумя состояниями непрерывного спектра. В данном случае речь идет о переходе между состояниями свободно движущейся частицы с импульсами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$, а роль оператора возмущения играет функция $U(\mathbf{r})$. В качестве «интервала» состояний $d\nu$, берем элемент объема импульсного пространства $dp'_x dp'_y dp'_z$. Тогда формула (35,6) принимает вид

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 \delta\left(\frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}\right) dp'_x dp'_y dp'_z. \quad (67,9)$$

При этом волновая функция конечного состояния должна быть нормирована на δ -функцию в импульсном пространстве (ср. замечание перед (35,1)); согласно (12,10) нормированная таким образом плоская волна

$$\psi_{\mathbf{p}'} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \quad (67,10)$$

Функцию же начального состояния пронормируем на единичную плотность потока:

$$\psi_{\mathbf{p}} = \sqrt{\frac{m}{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (67,11)$$

(ср. (21,6)). Тогда «вероятность» (67,9) будет иметь размерность площади и будет представлять собой дифференциальное сечение рассеяния.

Фигурирующая в (67,9) в виде множителя δ -функция выражает собой сохранение энергии при упругом рассеянии, в силу которого величина импульса не меняется: $p' = p$. Эту δ -функцию можно исключить, перейдя к «сферическим координатам» в импульсном пространстве (т. е. заменив $dp'_x dp'_y dp'_z$ на $p'^2 dp' d\phi' = (p'/2) d(p'^2) d\phi'$) и проинтегрировав по $d(p')^2$. Интегрирование сводится к замене абсолютного значения p' на p (и умножению всего выражения на $2m$), и мы получим

$$d\sigma = \frac{2\pi m p}{\hbar} \left| \int \psi_{\mathbf{p}'}^* U \psi_{\mathbf{p}} dV \right|^2 d\phi'. \quad (67,12)$$

Подставив сюда функции (67,10) и (67,11), мы снова вернемся к результату (67,8). Этот способ вывода, приводящий сразу к сечению рассеяния, оставляет, однако, неопределенной фазу его амплитуды.

В формулах (67,5) и (67,8) рассеивающее поле $U(r)$ не предполагается центрально-симметричным. Если же $U=U(r)$, это интегрирование может быть продвинуто в общем виде несколько дальше. Для этого воспользуемся сферическими пространственными координатами r, ϑ, φ с полярной осью в направлении вектора $\mathbf{q}$ (полярный угол обозначаем через ϑ в отличие от угла рассеяния θ). Тогда

$$\int U(r) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi U(r) e^{-iqr \cos \vartheta} r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi dr.$$

Интегрирование по ϑ и φ может быть произведено, и в результате получаем следующую формулу для амплитуды рассеяния в центрально-симметричном поле:

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty U(r) \sin qr \cdot r dr. \quad (67,13)$$

Пусть a — радиус действия поля; рассмотрим формулу (67,13) в предельных случаях малых и больших значений произведения ka .

При $ka \ll 1$ (малые скорости) можно положить $\sin qr \approx qr$, так что амплитуда рассеяния

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) r^2 dr. \quad (67,14)$$

Рассеяние в этом случае изотропно по направлениям и не зависит от скорости частиц — в согласии с полученным в § 65 общим результатом.

В обратном предельном случае больших скоростей, когда $ka \gg 1$, рассеяние резко анизотропно и направлено вперед, в узком конусе с углом раствора $\Delta\theta \sim 1/ka$. Действительно, вне этого конуса величина q велика ($q \gg 1/a$), множитель $\sin qr$ в области действия поля ($r \leq a$) есть быстро осциллирующая знакопеременная функция и интеграл от его произведения на медленно меняющуюся функцию U близок к нулю.

Выясним теперь условия применимости рассмотренного приближения.

Вывод формулы (67,5) был основан на приближенном решении уравнения Шредингера в виде $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$, причем предполагается, что $\psi^{(1)} \ll \psi^{(0)}$. Достаточно потребовать выполнения этого условия в наиболее «опасной» области вблизи рассеивающего центра ($r=0$), а поскольку $|\psi^{(0)}|=1$, то надо потребовать $\psi^{(1)} \ll 1$. С другой стороны, при $r=0$ в интеграле (67,4) имеем $R=r'$, так что

$$\psi^{(1)}(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r') e^{i(kr' + kr')} \frac{dV'}{r'}. \quad (67,15)$$

Оценим этот интеграл в случаях малых и больших значений ka .

При $ka \ll 1$ экспоненциальный множитель в подынтегральном выражении можно заменить единицей, и тогда оценка интеграла дает

$$\psi^{(1)}(0) \sim \frac{m|U|}{\hbar^2 a} a^3,$$

где $|U|$ — порядок величины поля в пределах радиуса его действия. В результате получим условие

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad ka \ll 1. \quad (67,16)$$

Для оценки же интеграла при $ka \gg 1$ производим сначала интегрирование по направлениям $\mathbf{r}'$ (предполагая поле центральным). Аналогично выводу формулы (67,13) имеем

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(0) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\pi \int_0^\pi U(r') e^{ikr'(\cos\vartheta + 1)} 2\pi \sin\vartheta d\vartheta \cdot r' dr' = \\ &= -\frac{m}{\hbar^2 ik} \int_0^\infty U(r') (e^{2ikr'} - 1) dr'. \end{aligned}$$

При $ka \gg 1$ интеграл от члена с осциллирующим множителем $\exp(2ikr')$ близок к нулю, а интеграл от второго члена $\sim |U|a$. В результате получаем условие

$$|U| \ll \frac{\hbar^2 ka}{ma^2} = \frac{\hbar v}{a}, \quad ka \gg 1. \quad (67,17)$$

Очевидно, что если поле удовлетворяет условию (67,16), то оно удовлетворяет и более слабому условию (67,17) при $ka \gg 1$; таким образом, в этом случае борновское приближение применимо как при малых, так и при больших скоростях. Но при достаточно больших скоростях борновское приближение во всяком случае применимо, в силу (67,17), даже если не выполняется условие (67,16) его применимости при малых скоростях.

Задачи

1. Определить в борновском приближении сечение рассеяния сферической потенциальной ямой: $U = -U_0$ при $r < 0$, $U = 0$ при $r > a$.

Решение. Вычисление интеграла в (67,13) приводит к результату

$$d\sigma = 4a^2 \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{(\sin qa - qa \cos qa)^2}{(qa)^6} do.$$

Интегрирование по всем углам (которое удобно произвести, переходя к переменной $q = 2k \sin(\theta/2)$ и заменив do на $2\pi q dq/k^2$) дает полное сечение рассеяния

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \left[1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin 4ka}{(2ka)^3} - \frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4} \right].$$

В предельных случаях эта формула дает

$$\sigma = \frac{16\pi a^2}{9} \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \quad \text{при } ka \ll 1, \quad \sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \quad \text{при } ka \gg 1.$$

Первое из этих выражений соответствует амплитуде (2), найденной в задаче 1 § 65 другим способом.

2. То же в поле $U = (\alpha/r) e^{-r/a}$.

Решение. Вычисление интеграла в (67,13) дает

$$d\sigma = 4a^2 \left(\frac{\alpha ma}{\hbar^2} \right)^2 \frac{do}{(q^2 a^2 + 1)^2}. \quad (1)$$

Полное сечение

$$\sigma = 16\pi a^2 \left(\frac{\alpha ma}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{4k^2 a^2 + 1}.$$

Условие применимости этих формул получается из (67,16—17) с α/a в качестве U : $\alpha ma/\hbar^2 \ll 1$ или $\alpha/\hbar v \ll 1$.

Рассмотренный потенциал представляет собой «экранированное» кулоново поле с радиусом экранирования a . При $a \rightarrow \infty$ получается чисто кулоново поле, и дифференциальное сечение (1) переходит в формулу Резерфорда (§ 68).

§ 68. Формула Резерфорда

Применим формулу Борна к рассеянию в кулоновом поле. Будем, для определенности, говорить о рассеянии частиц с зарядом e на ядрах с зарядом Ze ; тогда $U = Ze^2/r$.

Согласно (67,5) задача сводится к вычислению компоненты Фурье функции $1/r$. Вместо прямого вычисления это удобнее сделать, исходя из дифференциального уравнения

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r), \quad (68,1)$$

которому удовлетворяет функция $1/r$ (см. I (59,10)) ¹⁾. Но, имея в виду также и некоторые другие применения, рассмотрим сначала даже более общий случай функции $\varphi(r)$, удовлетворяющий уравнению

$$\Delta\varphi = -4\pi r(r) \quad (68,2)$$

с заданной правой частью $4\pi r(r)$.

Разложим функцию $\varphi(r)$ в интеграл Фурье:

$$\varphi(r) = \int e^{iqr} \varphi_q \frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \quad d^3q = dq_x dq_y dq_z. \quad (68,3)$$

При этом

$$\varphi_q = \int \varphi(r) e^{-iqr} dV. \quad (68,4)$$

Применив к обеим сторонам равенства (68,3) оператор Лапласа и произведя дифференцирование под знаком интеграла, получим

$$\Delta\varphi = - \int q^2 e^{iqr} \varphi_q \frac{d^3q}{(2\pi)^3}.$$

Это значит, что компонента Фурье от выражения $\Delta\varphi$ есть $(\Delta\varphi)_q = -q^2\varphi_q$. С другой стороны, можно найти $(\Delta\varphi)_q$, взяв компоненту Фурье от обеих частей уравнения (68,2):

¹⁾ Другой способ вычисления состоит в предварительном введении «экранировки» кулонового поля и последующем устремлении радиуса экранировки к бесконечности (см. задачу 2 § 67).

$(\Delta\varphi)_q = -4\pi\rho_q$. Сравнив оба выражения, находим

$$\varphi_q = \frac{4\pi}{q^2} \rho_q = \frac{4\pi}{q^2} \int \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} dV. \quad (68,5)$$

В применении к функции $\varphi = 1/r$ имеем $\rho = \delta(\mathbf{r})$, а интеграл в правой стороне (68,5) обращается в 1, так что

$$\left(\frac{1}{r}\right)_q = \frac{4\pi}{q^2}. \quad (68,6)$$

Амплитуда же рассеяния в кулоновом поле, согласно (67,5) и (67,7),

$$f(\theta) = -\frac{mZe^2}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi}{q^2} = -\frac{Ze^2}{2mv^2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}, \quad (68,7)$$

где введена скорость v рассеиваемых частиц: $\hbar k = mv$. Отсюда находим для сечения рассеяния формулу

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (68,8)$$

совпадающую с классической формулой Резерфорда.

Ввиду медленности убывания кулонового поля в нем нельзя выделить конечной области пространства, в которой U было бы значительно больше, чем вне ее. Условие применимости борновского приближения к рассеянию в этом поле мы получим из (67,17), написав в нем переменное расстояние r вместо параметра a ; это приводит к неравенству

$$\frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1. \quad (68,9)$$

Как раз обратное неравенство получается из (63,2) как условие квазиклассичности рассеяния в кулоновом поле: $Ze^2/\hbar v \gg 1$. В этом случае рассеяние заведомо должно описываться формулой Резерфорда. Мы видим, следовательно, что эта формула получается в предельных случаях как больших, так и малых скоростей. Это обстоятельство делает естественным результат, к которому приводит квантовая теория

рассеяния, основанная на точном решении уравнения Шредингера в кулоновом поле: точная квантовомеханическая формула для сечения рассеяния совпадает с классической формулой Резерфорда (*Н. Момм, В. Гордон, 1928*)¹⁾.

§ 69. Столкновения одинаковых частиц

Особого рассмотрения требует случай столкновения двух одинаковых частиц. Мы видели (§ 46), что тождественность частиц приводит в квантовой механике к появлению своеобразного обменного взаимодействия между ними. Оно сказывается и на рассеянии (*Н. Момм, 1930*).

Будем говорить, для определенности, о столкновении двух одинаковых частиц со спином $\frac{1}{2}$ (два электрона, два нуклона). Орбитальная волновая функция системы из двух таких частиц должна быть симметричной по отношению к перестановке частиц, если полный спин системы $S=0$, и антисимметричной, если $S=1$ (§ 46). Поэтому описывающая рассеяние волновая функция, получающаяся путем решения обычного уравнения Шредингера, должна быть симметризована или антисимметризована по частицам. Перестановка частиц эквивалентна замене направления соединяющего их радиус-вектора на обратное. В системе координат, в которой покоится центр инерции, это означает, что r остается неизменным, а угол θ заменяется на $\pi-\theta$ (в связи с чем $z=r\cos\theta$ переходит в $-z$). Поэтому вместо асимптотического выражения волновой функции (62,3) мы должны написать

$$\psi = e^{ikz} \pm e^{-ikz} + \frac{1}{r} e^{ikr} [f(\theta) \pm f(\pi-\theta)]. \quad (69,1)$$

В силу тождественности частиц, нельзя, конечно, указать, которая из них есть рассеиваемая, а которая — рассеивающая. В системе центра инерции мы имеем две одинаковые распространяющиеся навстречу друг другу падающие плоские волны (e^{ikz} и e^{-ikz} в (69,1)). Расходящаяся же сферическая волна в (69,1) учитывает рассеяние обеих частиц, и вычисленный с ее помощью поток вероятности

¹⁾ Во избежание недоразумений подчеркнем, однако, что это не относится к выражению (68,7) для амплитуды рассеяния; точное выражение для $f(\theta)$ отличается от (68,7) фазовым множителем, зависящим от θ и v и обращающимся в 1 лишь при условии (68,9).

определяет вероятность того, что в данном элементе do телесного угла будет рассеяна какая-либо из частиц. Сечение рассеяния есть отношение этого потока к плотности потока в каждой из падающих плоских волн, т. е. по-прежнему определяется квадратом модуля коэффициента при e^{ikr}/r в волновой функции (69,1).

Таким образом, если суммарный спин сталкивающихся частиц $S=0$, то сечение рассеяния имеет вид

$$d\sigma_0 = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 do, \quad (69,2)$$

а если $S=1$, то

$$d\sigma_1 = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 do. \quad (69,3)$$

Характерно для обменного взаимодействия появление «интерференционного» члена $f(\theta)f^*(\pi - \theta) + f^*(\theta)f(\pi - \theta)$. Если бы частицы были отличными друг от друга, как в классической механике, то вероятность рассеяния какой-либо из них в данный элемент телесного угла do была бы равна просто сумме вероятностей отклонения одной из них на угол θ , а движущейся навстречу ей — на угол $\pi - \theta$; другими словами, сечение было бы равно

$$\{|f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2\} do. \quad (69,4)$$

В формулах (69,2—3) предполагается, что суммарный спин сталкивающихся частиц имеет определенное значение. Если же система не находится в определенном спиновом состоянии, то для определения сечения рассеяния надо произвести усреднение по всем возможным таким состояниям, считая их все равновероятными. Из числа $2 \cdot 2 = 4$ различных спиновых состояний системы двух частиц со спином $\frac{1}{2}$ одно состояние соответствует полному спину $S=0$ (проекции спинов частиц $\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$) и три состояния — спину $S=1$ (состояния с проекциями спинов частиц $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$; $-\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$; $-\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$). Поэтому вероятности системе иметь $S=0$ или $S=1$ равны соответственно $\frac{1}{4}$ или $\frac{3}{4}$, так что сечение

$$d\sigma = \frac{1}{4} d\sigma_0 + \frac{3}{4} d\sigma_1 = \left\{ |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \frac{1}{2} [f(\theta)f^*(\pi - \theta) + f^*(\theta)f(\pi - \theta)] \right\} do. \quad (69,5)$$

В качестве примера рассмотрим столкновение двух быстрых электронов, взаимодействующих по закону Кулона ($U=e^2/r$). При выполнении условия (68,9), $e^2/\hbar v \ll 1$ (v — скорость относительного движения частиц), можно воспользоваться для амплитуды ее выражением (68,7) в борновском приближении. При этом надо помнить, что m в этой формуле — приведенная масса обеих частиц, равная в данном случае $m_e/2$, где m_e — масса электрона. Подставив (68,7) в (69,5), получим

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{m_e v^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\theta}{2}} - \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}} \right] d\theta. \quad (69,6)$$

Эта формула относится к системе центра инерции двух электронов. Переход к лабораторной системе, в которой до столкновения один из электронов покоится, осуществляется (согласно (62,2)) просто заменой θ на 2θ . Тогда

$$d\sigma = \left(\frac{2e^2}{m_e v^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \vartheta} + \frac{1}{\cos^4 \vartheta} - \frac{1}{\sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta} \right] \cos \vartheta d\vartheta, \quad (69,7)$$

где $d\vartheta$ — элемент телесного угла в новой системе координат (при замене θ на 2θ элемент $d\theta$ надо заменить на $4 \cos \vartheta d\vartheta$, так как $\sin \theta d\theta d\varphi = 4 \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$). Последние члены в (69,6—7) отличают эти формулы от классических (см. I § 16).

Задача

Определить сечение рассеяния двух одинаковых частиц со спином $\frac{1}{2}$, поляризованных в направлениях, образующих друг с другом угол α .

Решение. Зависимость сечения σ от поляризаций частиц должна выражаться членом, пропорциональным скаляру $\vec{s}_1 \vec{s}_2$ — произведению средних значений векторов спина обеих частиц; для частиц, поляризованных под углом α друг к другу, это произведение $\vec{s}_1 \vec{s}_2 = \frac{1}{4} \cos \alpha$. Ищем σ в виде $\sigma = a + 4b \vec{s}_1 \vec{s}_2$. Для неполяризованных частиц второй член отсутствует ($\vec{s}_1 = \vec{s}_2 = 0$) и, согласно (69,5), $\sigma = a = \frac{1}{4}(\sigma_0 + 3\sigma_1)$. Если же обе частицы поляризованы в одном направлении ($\alpha = 0$), т. е. имеют одинаковые проекции спина на одно и то же направление, то система заведомо находится в состоянии с $S=1$; в этом случае, следовательно, $\sigma = a + b = \sigma_1$. Определив из полученных двух равенств a и b , найдем

$$\sigma = \frac{1}{4} \{(\sigma_0 + 3\sigma_1) + (\sigma_1 - \sigma_0) \cos \alpha\}.$$

§ 70. Упругие столкновения быстрых электронов с атомами

Упругие столкновения быстрых электронов с атомами могут быть рассмотрены в борновском приближении, если скорость падающего электрона велика по сравнению со скоростями атомных электронов.

Ввиду большой разницы в массах между электроном и атомом последний можно считать при столкновении неподвижным, и система центра инерции атома и электрона совпадает тогда с лабораторной системой координат, в которой неподвижен атом. Тогда $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ в формулах § 67 обозначают импульсы электрона до и после столкновения, m — масса электрона, а угол θ совпадает с углом ϑ отклонения электрона.

В § 67 мы вычисляли матричный элемент $U_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ энергии взаимодействия по отношению к волновым функциям свободной частицы до и после столкновения. При столкновении же с атомом необходимо учитывать также и волновые функции, описывающие его внутреннее состояние. Поэтому вместо $U_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ в формуле (67,8) должен фигурировать матричный элемент энергии взаимодействия электрона с атомом U , взятый по отношению к волновым функциям как электрона, так и атома. Поскольку при упругом рассеянии состояние атома не меняется, то по отношению к нему матричный элемент диагонален. Таким образом, формула для сечения должна быть написана в виде

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \iint \psi_0^* U e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_0 d\tau dV \right|^2 d\Omega, \quad (70,1)$$

где ψ_0 — атомная волновая функция (зависящая от координат всех Z электронов в атоме), а $d\tau = dV_1 \dots dV_Z$ — элемент конфигурационного пространства атомных электронов.

Интеграл

$$\int \psi_0^* U \psi_0 d\tau$$

представляет собой энергию взаимодействия электрона с атомом, усредненную по состоянию атома. Ее можно представить также и в виде $e\varphi(r)$, где $\varphi(r)$ — потенциал

электрического поля, создаваемого средним распределением зарядов в атоме.

Обозначив плотность этого распределения посредством $\rho(\mathbf{r})$, имеем для потенциала ϕ уравнение Пуассона

$$\Delta\phi = -4\pi\rho(\mathbf{r}).$$

Искомый матричный элемент в (70,1) есть компонента Фурье $e\phi_q$. Согласно (68,5) ее вычисление сводится к вычислению компоненты Фурье плотности зарядов ρ . Последняя составляется из электронных зарядов и заряда ядра:

$$\rho = -|e|n(\mathbf{r}) + Z|e|\delta(\mathbf{r}),$$

где $n(\mathbf{r})$ — плотность числа электронов в атоме. Умножая на $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ и интегрируя, имеем

$$\int \rho e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV = -|e| \int n e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV + Z|e|.$$

Таким образом, получим для интересующего нас матричного элемента выражение

$$\iint \psi_0^* U e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_0 d\tau dV = -\frac{4\pi e^2}{q^2} [Z - F(q)], \quad (70,2)$$

где величина $F(q)$ определяется формулой

$$F(q) = \int n e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV \quad (70,3)$$

и называется *атомным форм-фактором*. Он является функцией угла рассеяния и скорости падающего электрона.

Наконец, подставив (70,2) в (70,1), получим окончательно следующее выражение для сечения упругого рассеяния быстрых электронов атомом ¹⁾:

$$d\sigma = \frac{4m^2 e^4}{\hbar^4 q^4} [Z - F(q)]^2 d\omega. \quad (70,4)$$

¹⁾ Мы пренебрегаем обменными эффектами между рассеиваемым электроном и атомными электронами, т. е. не производим симметризации волновой функции системы. Законность этого пренебрежения связана с тем, что интерференционные члены в сечении погашаются ввиду быстрой осцилляции волновой функции падающего электрона вдоль объема атома, по которому простирается медленно меняющаяся волновая функция атомных электронов.

Переменная $\hbar q$ есть величина импульса, передаваемого электроном атому. Она связана со скоростью электрона v и углом рассеяния ϑ формулой

$$q = \frac{2mv}{\hbar} \sin \frac{\vartheta}{2} \quad (70,5)$$

(ср. (67,7)).

Рассмотрим предельный случай малых значений q — малых по сравнению с $1/a$, где a — порядок величины размеров атома ($qa \ll 1$). Малым q соответствуют малые углы рассеяния: $\vartheta \ll v_0/v$, где $v_0 \sim \hbar/ma$ — порядок величины скоростей атомных электронов.

Разложим $F(q)$ в ряд по степеням q . Член нулевого порядка равен $\int n dV$, т. е. полному числу Z электронов в атоме.

Член первого порядка пропорционален $\int \mathbf{r}n(r) dr$, т. е. среднему значению дипольного момента атома; это значение обращается тождественно в нуль (§ 54). Поэтому надо произвести разложение до члена второго порядка, что дает

$$Z - F(q) = \frac{1}{2} \int (\mathbf{qr})^2 n dV = \frac{q^2}{6} \int nr^2 dV;$$

подставив в (70,4), получим

$$d\sigma = \left| \frac{me^2}{3\hbar^2} \int nr^2 dV \right|^2 d\omega. \quad (70,6)$$

Таким образом, в области малых углов сечение оказывается не зависящим от угла рассеяния и определяется средним квадратом расстояния атомных электронов от ядра.

В обратном предельном случае больших q ($qa \gg 1$) множитель $e^{-i\mathbf{qr}}$ в подынтегральном выражении в (70,3) есть быстро осциллирующая функция, и потому весь интеграл близок к нулю. Можно, следовательно, пренебречь $F(q)$ по сравнению с Z ; тогда остается

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2} \right)^2 \frac{d\omega}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}, \quad (70,7)$$

т. е. резерфордовское сечение рассеяния на ядре атома.

Задача

Вычислить сечение упругого рассеяния быстрых электронов атомом водорода в нормальном состоянии.

Решение. Волновая функция нормального состояния атома водорода есть (в обычных единицах) $\psi = \pi^{-1/2} e^{-r/a_B}$, где $a_B = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус (см. (31,15)). Электронная плотность $n = |\psi|^2$. Интегрирование в (70,3) по углам производится, как при выводе формулы (67,13), и дает

$$F = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty n(r) \sin qr \cdot r dr = \left(1 + \frac{a_B^2 q^2}{4}\right)^{-2}.$$

Подставив в (70,4), получим

$$d\sigma = 4a_B^2 \frac{(8 + a_B^2 q^2)^2}{(4 + a_B^2 q^2)^4} d\vartheta.$$

Полное сечение удобно вычислить, полагая

$$d\sigma = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta = 2\pi \left(\frac{\hbar}{mv}\right)^2 q dq$$

и интегрируя по dq ; при этом, разумеется, надо сохранить (боровское приближение!) лишь член наиболее низкой степени по $1/v$. В результате получим

$$\sigma = \frac{7\pi}{3} \left(\frac{\hbar}{mv}\right)^2.$$

Глава X

НЕУПРУГИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ

§ 71. Принцип детального равновесия

Неупругими называют столкновения, сопровождающиеся изменением внутреннего состояния сталкивающихся частиц. Эти изменения мы понимаем здесь в самом широком смысле, в частности, может меняться сам род частиц и их число. Так, речь может идти о возбуждении или ионизации атомов, возбуждении или распаде ядер и т. п. В тех случаях, когда столкновение (например, ядерная реакция) может сопровождаться различными физическими процессами, говорят о различных *каналах реакции*.

Исходя из симметрии теории по отношению к обращению времени, можно установить весьма общее соотношение, связывающее вероятности или сечения различных неупругих процессов. Для определенности, будем говорить здесь о реакциях вида $a+b \rightarrow c+d$, в которых как в начальном, так и в конечном состояниях имеется по две частицы.

Для удобства рассуждений будем сначала считать, что движение частиц происходит в некотором большом, но конечном объеме Ω (имея в виду перейти затем к пределу $\Omega \rightarrow \infty$). Тогда спектр свободного движения частиц из непрерывного станет дискретным, с очень малыми интервалами между уровнями энергии, стремящимися к нулю при $\Omega \rightarrow \infty$ (ср. конец § 27).

Пусть ω_{fi} есть вероятность перехода системы сталкивающихся частиц из некоторого состояния i в состояние f ¹⁾. Каждое из этих состояний характеризуется (помимо рода

¹⁾ Индекс конечного состояния мы ставим слева от индекса начального состояния для единообразия с общепринятым порядком расположения индексов в матричных элементах переходов.

частиц) также и определенными векторами их скоростей и определенными значениями проекций их спинов¹⁾. Обращение времени меняет, прежде всего, знаки скоростей и знаки проекций спинов²⁾; состояния, отличающиеся от i и f этими изменениями, обозначим через i^* и f^* ; о них говорят как о состояниях, *обращенных по времени* по отношению к состояниям i и f . Кроме того, начальное состояние становится конечным, а конечное — начальным. В силу симметрии уравнений квантовой механики по отношению к обращению времени, вероятности переходов $i \rightarrow f$ и $f^* \rightarrow i^*$ должны быть одинаковыми:

$$w_{fi} = w_{i^*f^*}. \quad (71,1)$$

Это утверждение составляет содержание *принципа детального равновесия*.

Перейдем от вероятностей к сечениям реакций. Обозначим через $\mathbf{p}_i$, $\mathbf{v}_i$ и $\mathbf{p}_f$, $\mathbf{v}_f$ импульсы и скорости относительного движения двух начальных и двух конечных частиц. Пусть $d\sigma_{fi}$ есть сечение столкновений, в результате которых $\mathbf{v}_f$ оказывается направленным в элементе телесных углов $d\Omega_f$ (в системе центра инерции обеих частиц). Суммарные энергии обеих частиц до и после столкновения, конечно, одинаковы ($E_i = E_f$). Введем, однако, сечение, отнесенное формально к интервалу dE_f значений энергии в конечном состоянии, рассматриваемой как переменная величина. Такое сечение надо написать в виде

$$d\sigma_{fi} \cdot \delta(E_f - E_i) dE_f. \quad (71,2)$$

Стоящая здесь δ -функция обеспечивает соблюдение закона сохранения энергии.

По определению понятия сечения столкновений, оно получается делением вероятности данного процесса на плотность падающего потока частиц. Последняя равна v_i/Ω

¹⁾ Для «сложных» частиц (атом, атомное ядро) под «спином» надо понимать здесь полный собственный момент, составленный как из спинов, так и из орбитальных моментов внутреннего движения составных частей (электронов, нуклонов).

²⁾ Определенное поведение при обращении времени является свойством каждой физической величины, не зависящим, конечно, от применимости той или иной механики. Поведение момента импульса очевидно из его классического выражения $[\mathbf{rp}] = m[\mathbf{rv}]$; он меняет знак вместе со скоростью.

(множитель $1/\Omega$ есть плотность числа частиц, отвечающая одной частице в объеме Ω). Кроме того, надо учесть, что сечение (71,2) отнесено к интервалам do_f и dE_f , между тем как вероятность w_{fi} относится к строго определенным значениям v_f и E_f . Поэтому для получения сечения $d\sigma_{fi}$ надо еще умножить w_{fi} на число квантовых состояний, приходящихся на заданный интервал направлений и величины скорости v_f (или импульса p_f). Это число равно

$$\frac{\Omega p_f^2 dp_f do_f}{(2\pi\hbar)^3}$$

(ср. (27,8)).

Резюмируя эти рассуждения, можем написать следующее соотношение между сечением и вероятностью:

$$d\sigma_{fi} \cdot \delta(E_f - E_i) dE_f = \frac{w_{fi}}{v_i/\Omega} \frac{\Omega p_f^2 dp_f do_f}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Отсюда

$$w_{fi} = \frac{(2\pi\hbar)^3 v_i d\sigma_{fi} \cdot \delta(E_f - E_i) dE_f}{\Omega^2 p_f^2 dp_f do_f} = \delta(E_f - E_i) \frac{(2\pi\hbar)^3 v_i v_f}{\Omega^2} \frac{d\sigma_{fi}}{p_f^2 do_f}$$

(здесь введена скорость v_f согласно равенству $dE_f/dp_f = v_f$, очевидному из того, что кинетическая энергия относительного движения частиц входит в E_f как слагаемое). Наконец, написав в таком же виде вероятность $w_{f^*i^*}$, приравняв оба выражения и сократив общие множители, получим

$$\frac{d\sigma_{fi}}{p_f^2 do_f} = \frac{d\sigma_{i^*f^*}}{p_i^2 do_i}. \quad (71,3)$$

Это соотношение выражает принцип детального равновесия в терминах сечений. Объем Ω из него выпал; поэтому оно сохраняется в том же виде и в пределе $\Omega \rightarrow \infty$.

Равенства (71,1) или (71,3) связывают между собой вероятности или сечения двух процессов $i \rightarrow f$ и $f^* \rightarrow i^*$, которые хотя и не являются прямым и обратным в буквальном смысле ($i \rightarrow f$ и $f \rightarrow i$), но по своему физическому смыслу очень близки к ним.

Разница между переходами $i \rightarrow f$ и $i^* \rightarrow f^*$ исчезает вовсе, если рассматривать интегральные сечения, проинтегрированные по всем направлениям $\mathbf{p}_f$, просуммированные по направлениям спинов конечных частиц $\mathbf{s}_{if}$, $\mathbf{s}_{if}$ и усреднен-

ные по направлениям импульса $\mathbf{p}_i$ и спинов $\mathbf{s}_{1i}$, $\mathbf{s}_{2i}$ начальных частиц. Обозначим такое сечение через $\bar{\sigma}_{fi}$:

$$\bar{\sigma}_{fi} = \frac{1}{4\pi(2s_{1i}+1)(2s_{2i}+1)} \sum_{(m_s)} \iint d\sigma_{fi} d\omega_i; \quad (71,4)$$

сумма берется по проекциям спинов всех частиц; множитель же перед знаками сумм и интегралов связан с тем, что по величинам, относящимся к начальным частицам, производится не суммирование, а усреднение. Написав (71,3) в виде

$$p_i^2 d\sigma_{fi} d\omega_i = p_f^2 d\sigma_{if} d\omega_f$$

и произведя указанные действия, получим искомое соотношение:

$$g_i p_i^2 \bar{\sigma}_{fi} = g_f p_f^2 \bar{\sigma}_{if}. \quad (71,5)$$

Через g_i и g_f здесь обозначены величины

$$\begin{aligned} g_i &= (2s_{1i}+1)(2s_{2i}+1), \\ g_f &= (2s_{1f}+1)(2s_{2f}+1), \end{aligned} \quad (71,6)$$

определяющие числа возможных ориентаций спинов пары начальных и пары конечных частиц; эти числа называют *спиновыми статистическими весами* состояний i и f .

Задачи¹⁾

1. Найти связь между сечениями фотоэффекта $\sigma_{\text{ф}}$ (ионизация атома при поглощении фотона $\hbar\omega$) и радиационной рекомбинации $\sigma_{\text{рек}}$ (захват свободного электрона ионом с образованием нейтрального атома и одновременным испусканием фотона).

Решение. Состояниями i и f в (71,5) являются в данном случае состояния систем ион+электрон и атом+фотон. Искомое соотношение имеет вид

$$(2J_{\text{и}}+1) p^2 \bar{\sigma}_{\text{рек}} = 2(2J_{\text{ат}}+1) \left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 \bar{\sigma}_{\text{ф}},$$

где $J_{\text{и}}$ и $J_{\text{ат}}$ — моменты иона и атома, $p=mv$ — импульс падающего на неподвижный ион электрона, $\hbar\omega/c$ — импульс фотона; множитель 2 — статистический вес фотона (два направления поляризации).

2. Найти связь между сечением фоторасщепления дейтрона и радиационного захвата протона нейтроном.

¹⁾ В этих задачах используются некоторые понятия (относящиеся к фотону), которые будут введены в гл. XI.

Решение. Спинный статистический вес системы нейтрон + протон равен $2 \cdot 2 = 4$, а статистический вес дейтрона (в основном состоянии с $S=1$) и фотона равен $3 \cdot 2 = 6$. Поэтому $4p^2 \bar{\sigma}_{\text{захв}} = 6(\hbar\omega/c)^2 \bar{\sigma}_f$, где p — импульс относительного движения сталкивающихся протона и нуклона. Этот импульс связан с энергией связи дейтрона I и энергией испускаемого при захвате γ -кванта $\hbar\omega$ законом сохранения энергии: $I + p^2/M = \hbar\omega$ (приведенная масса равна $M/2$, где M — масса нуклона). Окончательно

$$2Mc^2 (\hbar\omega - I) \bar{\sigma}_{\text{захв}} = 3 (\hbar\omega)^2 \bar{\sigma}_f.$$

§ 72. Упругое рассеяние при наличии неупругих процессов

Наличие неупругих каналов оказывает определенное влияние также и на свойства упругого рассеяния.

Волновая функция ψ , описывающая процесс упругого рассеяния, складывается из падающей плоской волны и расходящейся сферической волны. Ее можно представить также и в виде суммы сходящихся и расходящихся «парциальных» (т. е. отвечающих определенным значениям орбитального момента l) волн, как это было сделано в § 62. Но в полученной там формуле (62,7) амплитуды каждой пары сходящейся и расходящейся парциальных волн были одинаковыми: в квадратных скобках в каждом члене суммы (62,7) множители e^{-ikr} и e^{ikr} стоят с одинаковыми (равными 1) по модулю коэффициентами. При чисто упругом рассеянии это соответствует физическому смыслу задачи, но при наличии неупругих каналов амплитуды расходящихся волн должны быть меньше амплитуд сходящихся волн. Поэтому асимптотическое выражение ψ будет иметь вид

$$\psi = \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) [(-1)^l e^{-ikr} - S_l e^{ikr}], \quad (72,1)$$

отличающийся от (62,7) тем, что в качестве коэффициентов при e^{ikr} стоят (вместо $\exp(2i\delta_l)$) некоторые комплексные величины S_l , по модулю меньшие единицы. Соответственно и амплитуда упругого рассеяния будет определяться выражением, отличающимся от (62,8) такой же заменой:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (S_l - 1) P_l(\cos \theta). \quad (72,2)$$

Для полного сечения упругого рассеяния σ_e получим вместо (62,9) формулу

$$\sigma_e = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |1 - S_l|^2. \quad (72,3)$$

Полное сечение неупругого рассеяния или, как говорят, *сечение реакций* σ_r , по всем возможным каналам, тоже можно выразить через величины S_l . Для этого достаточно заметить, что для каждого значения l интенсивность расходящейся волны ослаблена по сравнению с интенсивностью сходящейся волны в отношении $|S_l|^2$. Это ослабление должно быть целиком отнесено за счет неупругого рассеяния. Поэтому ясно, что

$$\sigma_r = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2l+1) (1 - |S_l|^2), \quad (72,4)$$

а полное сечение

$$\sigma_t = \sigma_e + \sigma_r = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2l+1) (2 - S_l - S_l^*). \quad (72,5)$$

Каждый из членов сумм в (72,3) и (72,4) есть парциальное сечение соответственно упругого и неупругого рассеяния частиц с орбитальным моментом l . Значение $S_l = 1$ соответствует полному отсутствию какого-либо рассеяния (с данным l). Случай же $S_l = 0$ отвечает полному «поглощению» частиц с данным l (в (72,1) отсутствует парциальная расходящаяся волна с этим l); при этом сечения упругого и неупругого рассеяния одинаковы. Отметим также, что хотя упругое рассеяние может существовать и без неупругого (при $|S_l| = 1$), но обратное невозможно: наличие неупругого рассеяния непременно приводит к одновременному наличию упругого рассеяния.

При $\theta \rightarrow 0$ амплитуда упругого рассеяния (72,2) стремится к значению

$$f(0) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i (1 - S_l).$$

Сравнив это выражение с (72,5), найдем следующее соотношение между мнимой частью амплитуды упругого рас-

сеяния на нулевой угол и полным сечением рассеяния по всем каналам:

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_t \quad (72,6)$$

(так называемая *оптическая теорема* для рассеяния).

§ 73. Неупругое рассеяние медленных частиц

Изложенный в § 65 вывод предельного закона упругого рассеяния при малых энергиях легко обобщается на случай наличия неупругих процессов.

Как и прежде, основную роль при малых энергиях играет s -рассеяние ($l=0$). Напомним, что согласно результатам § 65 величина $S_0 = \exp(2i\delta_0)$ при малых k была равна

$$S_0 \approx 1 + 2i\delta_0 = 1 + 2ik\beta, \quad (73,1)$$

где $\beta = c_2/c_1$ — вещественная постоянная (см. (65,6)). Вещественность c_1, c_2 была связана с тем, что они представляли собой коэффициенты в решении ψ вещественного уравнения (уравнение Шредингера) при вещественных же граничных условиях — асимптотический вид стоячей волны при $r \rightarrow \infty$. Свойства волновой функции ψ при наличии неупругих процессов меняются лишь в том отношении, что налагаемое на нее условие на бесконечности теперь комплексно — асимптотическое выражение (72,1) с различными амплитудами сходящихся и расходящихся волн уже не сводится к вещественной стоячей волне.

В связи с этим будет комплексной и постоянная β : $\beta = \beta' + i\beta''$. При этом модуль $|S_0|$ уже не равен 1; условие же $|S_0| < 1$ означает, что мнимая часть величины β должна быть отрицательной: $\beta'' < 0$.

Оставив в суммах (72,3—4) лишь по первому члену, и подставив в них (73,1), найдем сечения упругого и неупругого рассеяния:

$$\sigma_e = 4\pi |\beta|^2, \quad (73,2)$$

$$\sigma_r = \frac{4\pi}{k} |\beta''|. \quad (73,3)$$

Таким образом, сечение упругого рассеяния по-прежнему не зависит от скорости. Сечение же неупругих процессов оказывается обратно пропорциональным скорости

частиц — так называемый закон $1/v$ (Г. Бете, 1935). Следовательно, при уменьшении скорости роль неупругих процессов возрастает по сравнению с упругим рассеянием.

Закон $1/v$ можно обосновать еще и другим способом, менее строгим, но более наглядным. Именно, будем считать, что вероятность возникновения реакции при столкновении пропорциональна квадрату модуля волновой функции падающей волны при $r=0$. Физически это предположение выражает собой тот факт, что, например, падающий на ядро медленный нейтрон может вызвать реакцию, лишь «пропикнув» в ядро. Разделив $|\psi_{\text{пад}}(0)|^2$ на плотность падающего потока (или, что то же, выбрав $\psi_{\text{пад}}$ нормированной на единичный поток), получим сечение реакции. Для нормированной на единичный поток плоской волны имеем $|\psi_{\text{пад}}|^2 \sim 1/v$, т. е. искомый результат.

В этом рассуждении подразумевается, что значение $\psi_{\text{пад}}(0)$ можно вычислить по невозмущенной полем волновой функции (плоская волна). Для этого — и тем самым для справедливости закона $1/v$ — необходимо, чтобы действующее на падающую частицу поле $U(r)$ достаточно быстро убывало с увеличением расстояния ¹⁾. Подчеркнем, в частности, что закон $1/v$ не справедлив для реакций между заряженными частицами, взаимодействующими по закону Кулона.

§ 74. Неупругие столкновения быстрых частиц с атомами

При столкновении быстрой частицы с атомом, наряду с упругим рассеянием, могут иметь место также и различные неупругие процессы — возбуждение атома или его ионизация. Эти процессы могут быть рассмотрены в борновском приближении, аналогично тому как это было сделано в § 70 для упругого рассеяния быстрых электронов. При этом предполагается, что скорость быстрой частицы велика по сравнению со скоростями атомных электронов.

Как уже было указано в § 70, при столкновении электрона с атомом систему центра инерции можно считать совпадающей с лабораторной системой координат, в которой покоится атом. Пусть снова $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ — начальный и конечный импульсы электрона, m — его масса. Введем также

¹⁾ Можно показать, что U должно убывать быстрее, чем $1/r^2$.

вектор передачи импульса от электрона к атому $\hbar \mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$. Величина q играет существенную роль в процессе, в значительной мере определяя характер столкновения. Мы рассмотрим два предельных случая: столкновения с передачей импульса, большой или малой по сравнению с $\hbar/a$, где a — атомные размеры.

Неравенство $qa \gg 1$ означает, что атому передается импульс, большой по сравнению с собственным первоначальным импульсом атомных электронов. Физически очевидно, что в этом случае можно рассматривать атомные электроны как свободные, а столкновение быстрого электрона с атомом — как упругое столкновение с первоначально покоившимся одним из атомных электронов. Сечение рассеяния на каждом из Z электронов дается формулой Резерфорда (если при этом оба электрона — падающий и атомный — приобретают в результате сравнимые по величине скорости, то становятся существенными обменные эффекты и сечение определяется формулой (69,7)).

Рассмотрим теперь обратный случай малых передач импульса: $qa \ll 1$. Это значит, что электрон отклоняется лишь на очень малый угол, а передаваемая им атому энергия мала по сравнению с его первоначальной энергией. Эти свойства позволяют положить $p \approx p'$; тогда вектор $\mathbf{q}$ есть просто результат поворота $\mathbf{p}$ без изменения его величины, и при малом угле рассеяния ϑ

$$\hbar q \approx p\vartheta. \quad (74,1)$$

Это выражение непригодно лишь при самых малых углах: в пределе $\vartheta \rightarrow 0$ величина q стремится к пределу $q_{\min} = (p - p')/\hbar$, определяемому малой разностью $p - p'$. Условие сохранения энергии при столкновении дает

$$E_n - E_0 = \frac{1}{2m} (p^2 - p'^2) \approx \frac{p}{m} (p - p') = v (p - p'),$$

где $E_n - E_0$ — энергия возбуждения атома при его переходе с основного на n -й уровень, v — скорость падающего электрона. Поэтому минимальное значение передачи импульса

$$\hbar q_{\min} = \frac{E_n - E_0}{v}. \quad (74,2)$$

После такого упрощения единственное отличие рассматриваемого процесса от упругого рассеяния будет сводиться

к тому, что начальное и конечное состояния атома не совпадают. Поэтому для сечения будем иметь прежнюю формулу (70,1), с тем лишь отличием, что вместо ψ_0 и ψ_0^* в интеграле надо писать различные волновые функции ψ_0 и ψ_n^* :

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \iint U e^{-iqr} \psi_n^* \psi_0 d\tau dV \right|^2. \quad (74,3)$$

Энергия U включает в себя взаимодействие падающего электрона как с ядром атома, так и со всеми Z атомными электронами:

$$U = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{a=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} \quad (74,4)$$

($\mathbf{r}$ — радиус-вектор падающей частицы, $\mathbf{r}_a$ — атомных электронов; начало координат — в точке нахождения ядра атома).

Для неупругих процессов при подстановке (74,4) в (74,3) член, содержащий взаимодействие с ядром, Ze^2/r , исчезает; интегрирование по $d\tau$ в этом члене отделяется в виде интеграла $\int \psi_n^* \psi_0 d\tau$, обращаемого в нуль в силу взаимной ортогональности функций ψ_0 и ψ_n . В остальных же членах интегрирование по dV осуществляется с помощью формулы

$$\int \frac{e^{-iqr}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} dV = \frac{4\pi}{q^2} e^{-iqr_a} \quad (74,5)$$

(для ее вывода достаточно заметить, что подстановкой $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a + \mathbf{r}'$ интеграл приводится к виду

$$e^{-iqr_a} \int e^{-iqr'} \frac{dV'}{r'} \equiv e^{-iqr_a} \left(\frac{1}{r} \right)_q,$$

а компонента Фурье от $1/r$ дается формулой (68,6)). В результате получим

$$d\sigma_n = \left(\frac{2me^2}{\hbar^2} \right)^2 \left| \left(\sum_a e^{-iqr_a} \right)_{n0} \right|^2 \frac{d\omega'}{q^4},$$

где матричный элемент берется по атомным волновым функциям:

$$\left(\sum_a e^{-iqr_a} \right)_{n0} = \sum_a \int e^{-iqr_a} \psi_n^* \psi_0 d\tau. \quad (74,6)$$

Теперь можно воспользоваться малостью q . Переменные $\mathbf{r}_a$ в интеграле (74,6) пробегают значения как раз в объеме с линейными размерами $\sim a$. Поэтому при $qa \ll 1$ во всей этой области малы также и величины $q\mathbf{r}_a$ и можно положить

$$e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a} \approx 1 - i\mathbf{q}\mathbf{r}_a = 1 - iqx_a \quad (74,7)$$

(направление вектора $\mathbf{q}$ выбрано в качестве оси x). Тогда

$$\left(\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a} \right)_{n0} = -iq \left(\sum_a x_a \right)_{n0} = -i \frac{q}{e} (d_x)_{n0},$$

где $d_x = \sum_a ex_a$ — декартова компонента дипольного момента

атома (член же с 1 обращается в нуль ввиду ортогональности функций ψ_0 и ψ_n). Положив также

$$d\sigma' = 2\pi \sin\vartheta d\vartheta \approx 2\pi\vartheta d\vartheta = 2\pi \left(\frac{\hbar}{mv} \right)^2 q dq,$$

получим для сечения процесса выражение

$$d\sigma_n = 8\pi \left(\frac{e}{\hbar v} \right)^2 |(d_x)_{n0}|^2 \frac{dq}{q}. \quad (74,8)$$

Мы видим, что сечение определяется квадратом матричного элемента дипольного момента атома ¹⁾.

¹⁾ Разумеется, здесь предполагается, что этот матричный элемент отличен от нуля. В противном случае разложение (74,7) должно было бы быть продолжено до членов более высокого порядка.

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ

Г л а в а XI

ФОТОН

§ 75. Соотношения неопределенности в релятивистской области

Изложенная в первой части квантовая теория имеет существенно нерелятивистский характер и неприменима к явлениям, сопровождающимся движением со скоростями, не малыми по сравнению со скоростью света. На первый взгляд можно было бы ожидать, что переход к релятивистской теории возможен путем более или менее непосредственного обобщения аппарата нерелятивистской квантовой механики. Внимательное рассмотрение показывает, однако, что это не так.

Мы видели, что квантовая механика сильно ограничивает возможность одновременного существования у электрона ¹⁾ различных динамических переменных. Так, неопределенности Δq и Δp , с которыми могут одновременно существовать координата и импульс, связаны соотношением $\Delta p \Delta q \sim \hbar$; чем с большей точностью измеряется одна из этих величин, тем с меньшей точностью может быть одновременно измерена другая.

Существенно, однако, что каждая из динамических переменных электрона в отдельности могла быть измерена со сколь угодно большой точностью, причем в течение сколь угодно короткого промежутка времени. Это обстоятельство играет фундаментальную роль для всей нерелятивистской квантовой механики. Именно благодаря нему можно было ввести понятие о волновой функции $\psi(q)$,

¹⁾ Как и в § 1, мы говорим для краткости об электроне, имея в виду любой квантовый объект.

квадрат модуля которой определяет вероятность получения (в результате произведенного в данный момент времени измерения) того или иного значения координаты электрона. Ясно, что необходимой предпосылкой для введения понятия о такой вероятности является принципиальная возможность осуществления сколь угодно точного и быстрого измерения координаты; в противном случае это понятие стало бы беспредметным и потеряло бы свой физический смысл.

Существование предельной скорости (скорости света c) приводит к новым принципиальным ограничениям возможностей измерения различных физических величин (Л. Д. Ландау, Р. Пайерлс, 1930).

В § 37 было получено соотношение

$$(v' - v) \Delta p \Delta t \sim \hbar, \quad (75,1)$$

связывающее неопределенность Δp измерения импульса электрона с продолжительностью Δt самого процесса измерения; v и v' — скорости электрона до и после измерения. Из этого соотношения следовало, что добиться достаточно точного измерения импульса в течение достаточно короткого времени (т. е. малого Δp при малом Δt) можно лишь ценой достаточно большого изменения скорости в результате самого процесса измерения. В нерелятивистской теории это обстоятельство являлось проявлением неповторимости измерения импульса через короткие промежутки времени, но ни в коей мере не затрагивало принципиальной возможности сколь угодно точного однократного измерения импульса, поскольку разность $v' - v$ могла быть сделана сколь угодно большой.

Наличие же предельной скорости меняет положение вещей коренным образом. Разность $v' - v$, как и сами скорости, не может теперь превышать c (точнее, $2c$). Заменив в (75,1) $v' - v$ на c , получим соотношение

$$\Delta p \Delta t \sim \frac{\hbar}{c}, \quad (75,2)$$

определяющее наилучшую принципиально достижимую точность измерения импульса при заданной продолжительности измерения Δt . Таким образом, в релятивистской теории оказывается принципиально невозможным сколь угодно точное и быстрое измерение импульса. Точное измерение

($\Delta p \rightarrow 0$) возможно лишь в пределе бесконечно большой продолжительности измерения.

Не менее глубокие изменения претерпевает также и измеримость координаты: в релятивистской теории она оказывается измеримой лишь с точностью, не превышающей определенного минимального предела. Тем самым понятие о локализации электрона претерпевает дальнейшее ограничение своего физического смысла.

В математическом формализме теории эта ситуация проявляется в несовместимости точного измерения координаты с утверждением о положительности энергии свободной частицы. Мы увидим в дальнейшем, что полная система собственных функций релятивистского волнового уравнения свободной частицы включает в себя (наряду с решениями с «правильной» зависимостью от времени) также и решения с «отрицательными частотами». Эти функции войдут, в общем случае, и в разложение волнового пакета, отвечающего электрону, локализованному в небольшом участке пространства.

Волновые функции с «отрицательной частотой» связаны, как будет показано, с существованием античастиц — позитронов. Появление этих функций в разложении волнового пакета выражает собой неизбежное в общем случае образование электрон-позитронных пар в процессе измерения координат электрона. Неконтролируемое самим процессом возникновение новых частиц очевидным образом лишает смысла измерение координат электрона.

В системе покоя электрона минимальная погрешность измерения его координат

$$\Delta q \sim \frac{\hbar}{mc}. \quad (75,3)$$

Этому значению (единственному, допустимому уже соображениями размерности) отвечает неопределенность импульса $\Delta p \sim mc$, которая, в свою очередь, соответствует минимальной пороговой энергии образования пары.

В системе отсчета, в которой электрон движется с энергией ϵ , вместо (75,3) имеем

$$\Delta q \sim \frac{\hbar c}{\epsilon}. \quad (75,4)$$

В частности, в предельном ультрарелятивистском слу-

чае энергия связана с импульсом соотношением $\varepsilon = cp$ и тогда

$$\Delta q \sim \frac{\hbar}{p}, \quad (75,5)$$

т. е. погрешность Δq совпадает с де-бройлевской длиной волны частицы.

Из сказанного ясно, что в последовательной релятивистской квантовой механике координаты частиц не могут фигурировать в качестве динамических переменных, которые по самому своему существу должны были бы иметь точный смысл. Не может сохраниться в своем прежнем смысле также и импульс частиц. Поскольку точное измерение импульса требует достаточно длинного времени, то следить за ходом его изменения в процессе оказывается невозможным.

Вспомнив сказанное в начале этого параграфа, можно заключить, что весь аппарат нерелятивистской квантовой механики становится неадекватным при переходе к релятивистской области. Можно думать, что понимаемые в прежнем смысле волновые функции $\psi(q)$, как носители ненаблюдаемой информации, не смогут фигурировать в аппарате последовательной релятивистской теории.

Импульс может фигурировать в последовательной теории лишь в применении к свободным частицам, у которых он сохраняется, и потому может быть измерен с любой точностью. Можно думать поэтому, что будущая теория вообще откажется от рассмотрения временного хода процессов взаимодействия частиц. Единственными наблюдаемыми величинами будут являться характеристики (импульсы, поляризации) свободных частиц — начальных частиц, вступающих во взаимодействие, и конечных частиц, возникших в результате процесса.

Характерная постановка вопроса в релятивистской квантовой теории состоит в определении амплитуд вероятности переходов, связывающих заданные начальные и конечные состояния системы частицы. Совокупность этих амплитуд между всеми возможными состояниями составляет *матрицу рассеяния* или *S-матрицу* ¹⁾. Эта матрица будет носителем

¹⁾ От английского слова scattering или немецкого Streuung — рассеяние.

всей информации о процессах взаимодействия частиц, имеющей наблюдаемый физический смысл (*В. Гейзенберг, 1938*).

Отметим также, что в такой теории должны лишиться прежнего смысла понятия об «элементарности» и «сложности» частиц — вопрос о том, что из чего состоит. Этот вопрос не может быть сформулирован без рассмотрения процесса взаимодействия между частицами, и отказ от такого рассмотрения тем самым делает вопрос беспредметным. Все частицы, фигурирующие как начальные или конечные в каком-либо физическом явлении столкновения, должны выступать в теории равноправным образом. В этом смысле разница между частицами, о которых обычно говорят как о «сложных» или как об «элементарных», имеет чисто количественный характер и сводится к относительной величине дефекта массы по отношению к распаду на те или иные «составные части». Так, утверждение о сложности дейтрона (с его сравнительно небольшой энергией связи по отношению к распаду на протон и нейтрон) лишь количественно отличается от утверждения о том, что нейтрон «состоит» из протона и π -мезона.

В настоящее время полной, логически замкнутой релятивистской квантовой теории еще нет. Мы увидим, что существующая теория вносит новые физические аспекты в характер описания состояния частиц, приобретающего некоторые черты теории поля. Она строится, однако, в значительной степени по образцу и с помощью понятий обычной квантовой механики. Такое построение теории привело к успеху в области квантовой электродинамики. Отсутствие полной логической замкнутости в этой теории проявляется в появлении расходящихся выражений при прямом применении ее математического аппарата, но для устранения этих расходимостей существуют вполне однозначные способы. Тем не менее, эти способы в значительной степени сохраняют характер полуэмпирических рецептов, и наша уверенность в правильности получающихся таким путем результатов основана в конечном счете лишь на их прекрасном согласии с опытом, а не на внутренней согласованности и логической стройности основных принципов теории.

Совсем иной характер имеет ситуация в области теории явлений, связанных с так называемыми сильными взаимодействиями частиц (ядерными силами). Здесь попытки

построения теории, базирующейся на тех же методах, не привели пока к возможности систематического получения реальных физических результатов. Построение полной теории, охватывающей сильные взаимодействия, потребует, вероятно, привлечения принципиально новых физических представлений.

§ 76. Квантование свободного электромагнитного поля¹⁾

Естественный путь перехода от классического к квантовому описанию электромагнитного поля лежит в классическом разложении поля на осцилляторы. Напомним, в чем состоит существо этого разложения (см. I § 76).

Будем описывать свободное электромагнитное поле (электромагнитные волны) потенциалами, выбранными в калибровке, в которой скалярный потенциал равен нулю, так что остается лишь векторный потенциал $\mathbf{A}$. Рассматривая поле в некотором большом, но конечном объеме пространства Ω , можно разложить его на бегущие плоские волны; потенциал изобразится тогда рядом вида

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} (\mathbf{c}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{c}_{\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}), \quad (76,1)$$

где коэффициенты $\mathbf{c}_{\mathbf{k}}$ зависят от времени по закону

$$\mathbf{c}_{\mathbf{k}} \sim e^{-i\omega t}, \quad \omega = |\mathbf{k}|, \quad (76,2)$$

причем каждый из них ортогонален соответствующему волновому вектору: $\mathbf{c}_{\mathbf{k}} \mathbf{k} = 0$ ²⁾. Суммирование в (76,1) производится по бесконечному, но дискретному набору близких значений волнового вектора (его трех компонент k_x, k_y, k_z).

¹⁾ Начиная отсюда, в гл. XI—XVI (за исключением мест, оговоренных особо) мы будем пользоваться так называемой *релятивистской системой единиц*, в которой скорость света c и квантовая постоянная $\hbar$ полагаются равными 1; тем самым достигается существенное упрощение записи формул. В этой системе энергия, импульс и масса имеют одинаковую размерность, совпадающую с размерностью обратной длины. Квадрат элементарного заряда в этих единицах совпадает со значением безразмерной (в обычных единицах) постоянной $e^2/\hbar c$, т. е. равен $1/137$.

²⁾ Определение коэффициентов $\mathbf{c}_{\mathbf{k}}$ в (76,1) отличается от определения коэффициентов $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ в I (76,1) множителем: $\mathbf{c}_{\mathbf{k}} = \mathbf{a}_{\mathbf{k}} \sqrt{\omega\Omega/2\pi}$. Целесообразность такого определения при переходе к квантовой теории выяснится ниже.

Переход от суммирования к интегрированию по непрерывному распределению можно произвести в дальнейшем с помощью выражения

$$\Omega \frac{dk_x dk_y dk_z}{(2\pi)^3} \quad (76,3)$$

для числа возможных значений $\mathbf{k}$, приходящихся на элемент объема $\mathbf{k}$ -пространства.

Заданием векторов $\mathbf{c}_k$ полностью определяется поле в рассматриваемом объеме. Таким образом, эти величины представляют собой дискретный набор классических «переменных поля». Для выяснения способа перехода к квантовой теории, однако, следует произвести еще некоторое преобразование этих переменных, в результате которого уравнения поля приобретают вид, аналогичный каноническим уравнениям (уравнениям Гамильтона) классической механики. Именно, канонические переменные поля определяются как вещественные величины

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_k &= \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\mathbf{c}_k + \mathbf{c}_k^*), \\ \mathbf{P}_k &= -\frac{i\omega}{\sqrt{2\omega}} (\mathbf{c}_k - \mathbf{c}_k^*) = \dot{\mathbf{Q}}_k. \end{aligned} \quad (76,4)$$

Функция Гамильтона (энергия) поля выражается через эти переменные как

$$H = \frac{1}{2} \sum_k (\mathbf{P}_k^2 + \omega^2 \mathbf{Q}_k^2).$$

Каждый из векторов $\mathbf{P}_k$ и $\mathbf{Q}_k$ перпендикулярен к волновому вектору $\mathbf{k}$, т. е. имеет по две независимые компоненты. Направление этих векторов определяет направление поляризации соответствующей волны. Обозначив компоненты векторов $\mathbf{P}_k$, $\mathbf{Q}_k$ (в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{k}$) посредством $P_{k\sigma}$, $Q_{k\sigma}$ ($\sigma = 1, 2$), перепишем функцию Гамильтона в виде

$$H = \sum_{k\sigma} H_{k\sigma}, \quad H_{k\sigma} = \frac{1}{2} (P_{k\sigma}^2 + \omega^2 Q_{k\sigma}^2). \quad (76,5)$$

Таким образом, функция Гамильтона распадается на сумму независимых членов, каждый из которых содержит только по одной паре переменных $P_{k\sigma}$, $Q_{k\sigma}$. Каждый такой

член соответствует бегущей волне с определенными волновым вектором и поляризацией, причем имеет вид функции Гамильтона одномерного гармонического осциллятора.

Такой способ классического описания поля делает очевидным путь перехода к квантовой теории. Мы должны рассматривать теперь канонические переменные — обобщенные координаты $Q_{k\sigma}$ и обобщенные импульсы $P_{k\sigma}$ — как операторы с обычными для координат и импульсов правилами коммутации:

$$\hat{P}_{k\sigma}\hat{Q}_{k\sigma} - \hat{Q}_{k\sigma}\hat{P}_{k\sigma} = -i \quad (76,6)$$

(операторы же с различными индексами $k\sigma$ все коммутативны друг с другом). Вместе с ними становится оператором также и потенциал поля A .

Гамильтониан поля получается заменой в (76,5) канонических переменных соответствующими операторами:

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \hat{H}_{k\sigma}, \quad \hat{H}_{k\sigma} = \frac{1}{2} (\hat{P}_{k\sigma}^2 + \omega^2 \hat{Q}_{k\sigma}^2). \quad (76,7)$$

Определение собственных значений этого гамильтониана не требует особых вычислений, так как сводится к задаче об уровнях энергии линейных осцилляторов, решение которой нам уже известно (§ 25). Поэтому мы можем сразу написать для уровней энергии поля

$$E = \sum_{k\sigma} \left(N_{k\sigma} + \frac{1}{2} \right) \omega, \quad (76,8)$$

где $N_{k\sigma}$ — целые числа.

Классическое выражение для импульса поля есть

$$\mathbf{P} = \sum_{k\sigma} \mathbf{n} H_{k\sigma},$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ (см. I (76,12)). Соответствующий оператор получается заменой $H_{k\sigma}$ на $\hat{H}_{k\sigma}$, а его собственные значения равны, следовательно,

$$\mathbf{P} = \sum_{k\sigma} \mathbf{k} \left(N_{k\sigma} + \frac{1}{2} \right). \quad (76,9)$$

К обсуждению формул (76,8—9) мы вернемся в следующем параграфе, а сейчас выпишем матричные элементы величин $Q_{k\sigma}$, что можно сделать сразу же с помощью

формул (25,4) для матричных элементов координаты осциллятора. Отличные от нуля матричные элементы равны

$$\langle N_{k\sigma} | Q_{k\sigma} | N_{k\sigma} - 1 \rangle = \langle N_{k\sigma} - 1 | Q_{k\sigma} | N_{k\sigma} \rangle = \sqrt{\frac{N_{k\sigma}}{2\omega}}. \quad (76,10)$$

Матричные же элементы величин $P_{k\sigma} = \dot{Q}_{k\sigma}$ отличаются от матричных элементов $Q_{k\sigma}$ (по общему правилу (11,8)) лишь множителем $\pm i\omega$:

$$\langle N_{k\sigma} | P_{k\sigma} | N_{k\sigma} - 1 \rangle = -\langle N_{k\sigma} - 1 | P_{k\sigma} | N_{k\sigma} \rangle = i\omega \sqrt{\frac{N_{k\sigma}}{2\omega}}.$$

Как будет ясно из дальнейшего, более глубоким смыслом обладают однако, не сами операторы $\hat{Q}_{k\sigma}$ и $\hat{P}_{k\sigma}$, а их линейные комбинации:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{k\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega \hat{Q}_{k\sigma} + i \hat{P}_{k\sigma}), \\ \hat{c}_{k\sigma}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega \hat{Q}_{k\sigma} - i \hat{P}_{k\sigma}), \end{aligned} \quad (76,11)$$

как раз соответствующие определению коэффициентов $\hat{c}_{k\sigma}$ в классическом разложении (76,1). Единственные отличные от нуля матричные элементы этих операторов равны

$$\langle N_{k\sigma} - 1 | c_{k\sigma} | N_{k\sigma} \rangle = \langle N_{k\sigma} | c_{k\sigma}^+ | N_{k\sigma} - 1 \rangle = \sqrt{N_{k\sigma}}. \quad (76,12)$$

С помощью определения (76,11) и правила (76,6) легко найти правило коммутации между операторами $\hat{c}_{k\sigma}$ и $\hat{c}_{k\sigma}^+$:

$$\hat{c}_{k\sigma} \hat{c}_{k\sigma}^+ - \hat{c}_{k\sigma}^+ \hat{c}_{k\sigma} = 1. \quad (76,13)$$

Таким образом, мы приходим к выражению оператора электромагнитного поля в виде

$$\hat{A} = \sum_{k\sigma} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} (\hat{c}_{k\sigma} \mathbf{e}^{(\sigma)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + c_{k\sigma}^+ \mathbf{e}^{(\sigma)*} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}). \quad (76,14)$$

Здесь введено обозначение $\mathbf{e}^{(\sigma)}$ для единичных векторов, определяющих поляризацию осцилляторов; векторы $\mathbf{e}^{(\sigma)}$ перпендикулярны волновым векторам $\mathbf{k}$, причем для каж-

ного k имеется по две независимые поляризации, нумеруемые индексом $\sigma=1, 2$ ¹⁾.

Выражение (76,14) соответствует обычному в нерелятивистской квантовой теории представлению операторов, подразумевавшемуся на всем протяжении первой части этой книги. В этом представлении (его называют *шредингеровским*) операторы различных физических величин сами по себе явной зависимости от времени не содержат. Временная же эволюция системы описывается временной зависимостью волновой функции. Аппарат квантовой механики можно, однако, сформулировать и в несколько другом, эквивалентном виде, в котором явная зависимость от времени перенесена с волновых функций на операторы; такое представление операторов называют *гейзенберговским*. Такая формулировка аппарата становится в особенности целесообразной при описании полей в релятивистской квантовой теории: равноправная зависимость операторов от координат и времени позволяет более явно выявить релятивистскую пространственно-временную инвариантность теории (между тем как в шредингеровской формулировке пространственные координаты и время входят крайне несимметричным образом).

Для оператора $\hat{A}$ переход к гейзенберговскому представлению сводится к добавлению в каждом члене суммы (76,14) множителя $e^{-i\omega t}$ (или ему сопряженного), соответствующего временной зависимости «стационарных состояний осцилляторов поля». Окончательное выражение оператора $\hat{A}$ запишем в виде

$$\hat{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\rho\sigma} (\hat{c}_{\rho\sigma} \mathbf{A}_{\rho\sigma} + \hat{c}_{\rho\sigma}^+ \mathbf{A}_{\rho\sigma}^*), \quad (76,15)$$

где

$$\mathbf{A}_{\rho\sigma} = \mathbf{e}^{(\sigma)} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})}. \quad (76,16)$$

В дальнейшем (при рассмотрении как электромагнитного поля, так и полей частиц) мы всегда будем подразумевать гейзенберговское представление операторов поля.

1) Напомним (см. § 70), что для линейной поляризации единичный вектор $\mathbf{e}$ веществен и непосредственно указывает направление поляризации. Для круговой (и в общем случае — эллиптической) поляризации вектор $\mathbf{e}$ — комплексный с определенным отношением вещественной и мнимой частей; единичность вектора надо понимать при этом как равенство $\mathbf{e}\mathbf{e}^* = 1$.

§ 77. ФОТОНЫ

Обратимся к обсуждению полученных формул квантования поля.

Прежде всего, формула (76,8) для энергии поля обнаруживает следующую трудность. Наиболее низкому уровню энергии поля соответствует равенство нулю квантовых чисел $N_{k\sigma}$ всех осцилляторов (это состояние называют состоянием *вакуума электромагнитного поля*). Но даже в этом состоянии каждый осциллятор обладает отличной от нуля «нулевой энергией» $\omega/2$. При суммировании же по всему бесконечному числу осцилляторов мы получим бесконечный результат. Таким образом, мы сталкиваемся с одной из «расходимостей», к которым приводит отсутствие полной логической замкнутости существующей теории.

Пока речь идет лишь о собственных значениях энергии поля, мы можем устранить эту трудность путем простого вычеркивания энергии нулевых колебаний, т. е. написав для энергии и импульса поля (в обычных единицах)

$$E = \sum_{k\sigma} N_{k\sigma} \hbar \omega, \quad \mathbf{P} = \sum_{k\sigma} N_{k\sigma} \hbar \mathbf{k}. \quad (77,1)$$

Эти формулы позволяют ввести основное для всей квантовой электродинамики понятие о *световых квантах* или *фотонах*¹⁾. Именно, можно рассматривать свободное электромагнитное поле как совокупность частиц, каждая из которых имеет энергию $\hbar \omega$ и импульс $\hbar \mathbf{k} = n \hbar \omega / c$. Соотношение между импульсом и энергией — такое, каким оно должно быть в релятивистской механике для частиц с равной нулю массой покоя, движущихся со скоростью света. Числа $N_{k\sigma}$ приобретают смысл чисел фотонов с заданными импульсами $\mathbf{k}$ и поляризациями $\mathbf{e}^{(\sigma)}$. Свойство поляризации фотона аналогично понятию спина у других частиц (специфические особенности фотона в этом отношении будут рассмотрены ниже, в следующем параграфе).

Легко видеть, что развитый в предыдущем параграфе математический формализм находится в полном соответствии с представлением о свободном электромагнитном поле как о совокупности фотонов; это есть не что иное, как аппарат вторичного квантования в применении к системе фото-

¹⁾ Представление о фотонах было впервые введено Альбертом Эйнштейном в 1905 г. в связи с теорией фотоэффекта.

нов. В этом методе (§ 47) роль независимых переменных играют числа заполнения состояний (в данном случае — числа $N_{k\sigma}$), а операторы действуют на функции этих чисел. При этом основную роль играют операторы «уничтожения» и «рождения» частиц, соответственно уменьшающие или увеличивающие на единицу числа заполнения. Именно такими операторами и являются $\hat{c}_{k\sigma}$, $\hat{c}_{k\sigma}^+$: оператор $\hat{c}_{k\sigma}$ уничтожает фотон в состоянии $k\sigma$ (он имеет матричные элементы лишь для переходов $N_{k\sigma} \rightarrow N_{k\sigma} - 1$, — см. (76,12)); оператор же $\hat{c}_{k\sigma}^+$ рождает фотон в этом состоянии — его матричные элементы отличны от нуля только для переходов $N_{k\sigma} \rightarrow N_{k\sigma} + 1$.

Плоские волны (76,16), фигурирующие в операторе (76,15) в качестве коэффициентов перед операторами уничтожения фотонов, можно трактовать как волновые функции фотонов с определенными импульсами k и поляризациями $\epsilon^{(\sigma)}$; эти функции нормированы на «1 фотон в объеме Ω ». Такая трактовка соответствует разложению (47,22) ψ -оператора по волновым функциям стационарных состояний частицы в нерелятивистском аппарате вторичного квантования ¹⁾.

В этой связи подчеркнем лишний раз, что «волновую функцию» фотона отнюдь нельзя рассматривать как амплитуду вероятности его пространственной локализации — в противоположность основному смыслу волновой функции в нерелятивистской квантовой механике. В случае фотона эта ситуация в особенности резко выражена. Для фотона всегда имеет место ультрарелятивистский случай, так что для минимальной погрешности его координат имеем согласно (75,5) $\Delta q \sim 1/k \sim \lambda$. Это значит, что о координатах фотона имеет смысл говорить только в тех случаях, когда характеристические размеры задачи велики по сравнению с длиной волны. Но это есть не что иное, как «классический» предельный случай, соответствующий геометрической оптике, в которой можно говорить о распространении света вдоль определенных траекторий — лучей. В квантовом же случае, когда длина волны не может рассматриваться как малая, понятие координат фотона становится беспредметным.

¹⁾ В отличие от (47,22), в разложение (76,15) входят одновременно как операторы уничтожения, так и операторы рождения частиц. Смысл этого отличия выяснится в гл. XIII.

Правило коммутации операторов рождения и уничтожения фотонов (76,13) соответствует случаю частиц, подчиняющихся статистике Бозе (ср. (47,11)). Таким образом, фотоны являются бозонами. В соответствии со свойствами этой статистики, число фотонов одновременно находящихся в любом заданном состоянии, может быть произвольным.

Описание поля как совокупности фотонов есть единственное описание, вполне адекватное физическому смыслу свободного электромагнитного поля в квантовой теории. Оно заменяет собой классическое описание с помощью потенциалов (а с ними и напряженностей) поля. Последние выступают в математическом аппарате фотонной картины как операторы вторичного квантования.

Свойства квантовой системы приближаются к классическим в тех случаях, когда велики квантовые числа, определяющие стационарные состояния системы (§ 27). Для свободного электромагнитного поля (в заданном объеме) это означает, что должны быть велики квантовые числа осцилляторов, т. е. числа фотонов $N_{k\sigma}$. В этом смысле глубокое значение имеет то обстоятельство, что фотоны подчиняются статистике Бозе. В математическом формализме теории связь статистики Бозе со свойствами классического поля проявляется в правилах коммутации операторов $c_{k\sigma}$, $c_{k\sigma}^+$. При больших $N_{k\sigma}$, когда велики матричные элементы этих операторов, можно пренебречь единицей в правой стороне перестановочного соотношения (76,13), в результате чего получится $\hat{c}_{k\sigma}\hat{c}_{k\sigma}^+ = \hat{c}_{k\sigma}^+\hat{c}_{k\sigma}$, т. е. эти операторы перейдут в коммутативные друг с другом классические величины $c_{k\sigma}$, $c_{k\sigma}$, определяющие классические потенциалы поля.

§ 78. Момент и четность фотона

Как и всякая частица, фотон может обладать определенным моментом импульса. Свойства этой величины у фотона, однако, несколько отличаются от ее свойств у обычных частиц. Для выяснения происхождения этого отличия напомним, каким образом связаны в математическом формализме квантовой механики свойства волновой функции частицы с ее моментом.

Момент частицы $\mathbf{j}$ складывается из ее орбитального момента $\mathbf{l}$ и собственного момента — спина $\mathbf{s}$. Волновая функция частицы со спином s есть симметричный спинор ранга $2s$,

т. е. представляет собой совокупность $2s+1$ компонент, которые при поворотах системы координат преобразуются друг через друга по определенному закону (§ 41). Орбитальный момент связан с координатной зависимостью волновых функций: состояниям с орбитальным моментом l соответствуют волновые функции, выражающиеся (линейно) через шаровые функции порядка l .

Роль волновой функции фотона играет вектор $\mathbf{A}$. Вектор эквивалентен спинору 2-го ранга, и в этом смысле фотону можно приписать спин 1. Поскольку это значение — целое, то отсюда, в свою очередь, следует, что и полный момент фотона может пробегать лишь целочисленные значения: $j=1, 2, 3, \dots$. Значения же $j=0$ для фотона не существует: волновая функция состояния с равным нулю моментом должна быть сферически-симметрична, что заведомо невозможно для поперечной волны.

В то время как понятие о полном моменте фотона имеет вполне точный смысл, смысл понятия о спине фотона лишь условен: для фотона нет возможности последовательным образом различать спин и орбитальный момент как составные части его полного момента. Дело в том, что такая возможность предполагает независимость «спиновых» и «координатных» свойств волновых функций: координатная зависимость компонент спинора (в данном случае — вектора) не должна ограничиваться никакими дополнительными условиями. Между тем векторная волновая функция фотона $\mathbf{A}$ подчинена дополнительному условию поперечности, в результате чего координатная зависимость уже не может быть задана для всех его компонент одновременно произвольным образом. Отметим, что к фотону неприменимо также и определение спина как момента покоящейся частицы, поскольку для фотона, движущегося со скоростью света, вообще не существует системы покоя.

Как и для всякой частицы, состояние фотона может характеризоваться также и его четностью, связанной с поведением волновой функции при инверсии системы координат: состояние называют четным, если векторная волновая функция $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ не меняется при инверсии, и нечетным — если $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ меняет знак ¹⁾. Принята определенная термино-

¹⁾ Воздействие операции инверсии на скалярную функцию $\varphi(\mathbf{r})$ сводится к изменению знака ее аргумента: $\hat{P}\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(-\mathbf{r})$. При воздей-

логия для различных состояний фотона с определенными моментами и четностями: фотон в состоянии с моментом j и четностью $(-1)^j$ называется *электрическим 2^j -польным* (или Ej -фотоном), а при четности $(-1)^{j+1}$ — *магнитным 2^j -польным* (или Mj -фотоном) ¹⁾. Момент и четность частицы часто обозначают единым символом, в котором число указывает значение j , а верхний индекс $+$ или $-$ отвечает четности $P=+1$ или -1 . Таким образом, фотонам электрического типа отвечают состояния $1^-, 2^+, 3^-, 4^+$ и т. д., а фотонам магнитного типа — состояния $1^+, 2^-, 3^+, 4^-$ и т. д. В частности, электрическому дипольному фотону отвечает состояние 1^- , а магнитному дипольному — состояние 1^+ .

Состояние фотона с определенным значением j представляет собой сферическую волну, в которой не существует какого-либо определенного направления движения. Напротив, если фотон имеет определенное направление движения (т. е. имеет определенный вектор импульса k), то он не имеет никакого определенного значения j . Фотон с определенным направлением k может, однако, иметь также и определенное значение проекции момента на это же направление; проекцию момента на направление импульса называют *спиральностью* частицы (обозначим ее буквой λ) ²⁾.

Сохранение спиральности, как и сохранение всякой вообще проекции момента, связано с определенными свойствами симметрии пространства по отношению к свободной частице. Импульс k выделяет собой избранное направление в пространстве. Наличие этого направления нарушает полную симметрию по отношению к произвольным поворотам системы координат (в результате чего вектор момента перестает сохраняться). Остается, однако, аксиальная симметрия по отношению к вращениям вокруг выделенной оси —

ствии же на векторную функцию $A(r)$ надо еще учесть, что изменение направления координатных осей на обратное меняет также знак всех компонент вектора (полярного). Другими словами, воздействие операции инверсии означает $\hat{P}A(r) = -A(-r)$. Поэтому, например, для четного состояния должно быть $A(-r) = -A(r)$, чтобы было $\hat{P}A(r) = A(r)$.

¹⁾ Эти названия соответствуют терминологии теории излучения: испускание фотонов электрического и магнитного типов определяется соответствующими электрическими и магнитными мультипольными моментами системы зарядов (см. § 98).

²⁾ Не смешивать ее с проекцией момента m на фиксированное направление (ось z) в пространстве!

направления $\mathbf{k}$. Выражением этой симметрии и является сохранение спиральности.

По определению оператора орбитального момента $\hat{\mathbf{l}} = \{\mathbf{r}\mathbf{p}\}$, оператор проекции этого момента на направление импульса (а тем самым и собственные значения этой проекции) тождественно равны нулю. Поэтому спиральность совпадает с проекцией спина частицы на направление ее движения. Для обычной частицы со спином 1 спиральность могла бы, следовательно, иметь значения $0, \pm 1$. Для фотона же, как сейчас будет показано, возможны лишь значения $\lambda = \pm 1$; здесь снова проявляется условность понятия спина фотона.

Легко видеть, что состояния фотона с определенными спиральностями совпадают с состояниями его круговой поляризации. Пусть ξ, η, ζ — система координат с осью ζ вдоль направления импульса фотона (в отличие от оси z , положение которой не связано с движением частицы). Рассмотрим, например, состояние фотона со спиральностью $\lambda = +1$. Согласно формулам (41,9), устанавливающим соответствие между компонентами векторной волновой функции (частицы со спином 1) и компонентами спинора 2-го ранга, такому состоянию отвечает волновая функция $\mathbf{A}$, компоненты которой связаны соотношениями $A_\eta = iA_\xi, A_\zeta = 0$; действительно, тогда из трех компонент спинора отлична от нуля только ψ^{11} , как раз отвечающая равной $+1$ ζ -проекции спина. Аналогичным образом, волновая функция с компонентами $A_\eta = -iA_\xi, A_\zeta = 0$ отвечает значению $\lambda = -1$. Вместе с вектором $\mathbf{A}$ таким же соотношениям удовлетворяет вектор поляризации $\mathbf{e}$, входящий множителем в выражение (76,16). Но значения $e_\eta = \pm ie_\xi$ как раз отвечают круговой поляризации (см. I § 70).

Невозможность же значения $\lambda = 0$ очевидна из того, что такому значению ζ -проекции спина должна была бы отвечать волновая функция с составляющими $A_\xi = A_\eta = 0, A_\zeta \neq 0$, эквивалентная (согласно (41,9)) спинорной компоненте ψ^{12} ; но такая функция исключается требованием поперечности вектора $\mathbf{A}$ по отношению к направлению $\mathbf{k}$.

Глава XII

УРАВНЕНИЕ ДИРАКА

§ 79. Уравнение Клейна — Фока

Изложение релятивистской квантовой теории частиц начнем с изучения свойств волновых функций, описывающих частицы, и с построения волнового уравнения, которому эти функции удовлетворяют. Напомним, что в нерелятивистской теории волновые функции частиц с различными спинами являются спинорами различных рангов, а волновые функции свободных частиц удовлетворяют одному и тому же уравнению — уравнению Шредингера для свободного движения. В релятивистской же теории, как мы увидим, уже вид волнового уравнения свободного движения существенно зависит от спина частицы.

Наиболее прост, естественно, случай частиц со спином 0. В нерелятивистской теории они описываются скалярными волновыми функциями. В релятивистской же теории место трехмерного скаляра занимает четырехмерный скаляр, инвариантный не только по отношению к преобразованиям пространственных координат, но и по отношению к преобразованиям Лоренца.

В релятивистской механике энергия частицы ϵ и ее импульс $\mathbf{p}$ составляют 4-вектор $p^\mu = (\epsilon, \mathbf{p})$ ¹⁾. Соответственно, образуют 4-вектор $\hat{p}^\mu$ также и операторы, отвечающие этим величинам. Трехмерному импульсу $\mathbf{p}$ отвечает оператор $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$, а энергии (функции Гамильтона) в волновом уравнении сопоставляется оператор дифференцирования по времени $i\partial/\partial t$ (ср. (8,1)).

¹⁾ В гл. XII—XVI мы будем обозначать релятивистскую энергию отдельной частицы, включающую в себя энергию покоя, буквой ϵ .

Таким образом, оператор 4-импульса

$$\hat{p}^\mu = \left(i \frac{\partial}{\partial t}, -i\nabla \right), \quad \hat{p}_\mu = \left(i \frac{\partial}{\partial t}, i\nabla \right) \quad (79,1)$$

или (в четырехмерных обозначениях)

$$\hat{p}_\mu = i \frac{\partial}{\partial x^\mu}. \quad (79,2)$$

Подействуем на волновую функцию Ψ скалярным оператором $\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu$ — квадратом 4-вектора $\hat{p}^\mu$. Но квадрат 4-импульса сводится к постоянной величине — квадрату массы m частицы. Поэтому и результат воздействия указанного оператора на произвольную волновую функцию Ψ должен сводиться к ее умножению на m^2 . Таким образом, мы приходим к уравнению

$$\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu \Psi = m^2 \Psi \quad (79,3)$$

или (в раскрытом виде)

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Delta \right) \Psi = m^2 \Psi \quad (79,4)$$

(О. Клейн, В. А. Фок, 1926).

Отметим, что для релятивистской частицы со спином 0 не существует гамильтониана в том смысле, как он был определен в нерелятивистской теории. Действительно, уравнение (79,4) — второго порядка по времени; между тем смысл гамильтониана $\hat{H}$ состоит в том, что он должен был бы определять первую производную волновой функции согласно $i\partial\Psi/\partial t = \hat{H}\Psi$.

Отметим также, что для частицы со спином 0 плотность вероятности ее различных локализаций в пространстве заведомо не могла бы определяться квадратом модуля $|\Psi|^2$ — уже по формальным соображениям (не говоря об изложенных в § 75 общих физических соображениях, вообще препятствующих рассмотрению волновой функции как носителя информации о пространственной локализации частицы). Дело в том, что в релятивистской теории плотность распределения частиц и плотность их потока образуют 4-вектор (ср. сказанное в I § 54 о 4-векторе плотности тока). Плотность частиц является временной компонентой этого 4-вектора, а отнюдь не скаляром. Поэтому она во

всяком случае не могла бы определяться скалярной величиной, каковой является квадрат модуля скалярной функции.

По причинам, которые будут указаны в дальнейшем (§ 92), описание частиц с помощью скалярного волнового уравнения (79,4) имеет вообще очень ограниченный смысл. Поэтому мы не станем останавливаться здесь на выяснении математической структуры тех величин, которые для этого уравнения играют роль 4-вектора плотности потока и плотности энергии частиц.

§ 80. Четырехмерные спиноры

В нерелятивистской квантовой теории частица со спином s описывается симметричным спинором ранга $2s$ — совокупностью $2s+1$ величин, преобразующихся друг через друга по определенному закону при поворотах системы координат. Этот закон выражает собой свойства симметрии частицы, связанные с изотропией пространства.

В релятивистской же теории повороты пространственной системы координат выступают лишь как частный случай четырехмерных вращений — поворотов четырехмерной пространственно-временной системы координат. О совокупности всех таких возможных преобразований говорят как о *группе Лоренца*. Наряду с трехмерными вращениями (поворотами, не меняющими направления оси времени) сюда входят также и обычные преобразования Лоренца — повороты в одной из плоскостей xt , yt или zt (см. I § 36). В общем же случае четырехмерный поворот представляет собой преобразование Лоренца вместе с поворотом пространственной системы координат.

Для описания частиц со спином в релятивистской квантовой теории возникает, таким образом, необходимость в построении теории *четырёхмерных спиноров* (4-спиноров), играющих по отношению к преобразованиям группы Лоренца такую же роль, какую обычные (трехмерные) спиноры играют по отношению к группе пространственных вращений¹⁾.

¹⁾ Другими словами, 4-спиноры осуществляют неприводимые представления группы Лоренца, подобно тому как трехмерные спиноры осуществляют неприводимые представления группы вращений.

4-спинор первого ранга

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \\ \xi^3 \end{pmatrix} \quad (80,1)$$

есть двухкомпонентная величина, которая при всех преобразованиях группы Лоренца преобразуется по формулам, аналогичным (41,3):

$$\xi^{1'} = \alpha \xi^1 + \beta \xi^2, \quad \xi^{2'} = \gamma \xi^1 + \delta \xi^2, \quad (80,2)$$

причем комплексные коэффициенты $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ являются теперь определенными функциями углов поворота 4-системы координат (в общем случае таких углов имеется 6 — по числу поворотов в шести координатных плоскостях xy, xz, yz, tx, ty, tz). Как компоненты волновой функции частицы со спином $\frac{1}{2}$, ξ^1 и ξ^2 отвечают собственным значениям z -проекции спина, равным соответственно $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$.

По той же причине, что и для трехмерных спиноров, коэффициенты преобразования (80,2) связаны друг с другом соотношением (41,5), которые выпишем здесь снова:

$$\alpha\delta - \gamma\beta = 1. \quad (80,3)$$

Этим равенством обеспечивается инвариантность билинейной антисимметричной комбинации

$$\xi^1 \Xi^2 - \xi^2 \Xi^1 \quad (80,4)$$

компонент любых двух спиноров ξ и Ξ . Как и в случае трехмерных спиноров, выражение (80,4) определяет собой правило образования скалярного произведения двух спиноров.

Отличие от трехмерного случая возникает, однако, при рассмотрении комплексно сопряженных спиноров. В теории трехмерных спиноров (§ 41) закон преобразования комплексно сопряженного спинора устанавливается требованием, чтобы сумма

$$\xi^1 \xi^{1*} + \xi^2 \xi^{2*}, \quad (80,5)$$

определяющая плотность вероятности локализации частицы в пространстве, была скаляром; отсюда возникали соотношения (41,6) между коэффициентами $\alpha, \beta, \gamma, \delta$. Но в релятивистской теории плотность частиц не является скаляром; она представляет собой временную компоненту 4-вектора

(как уже было отмечено в предыдущем параграфе). В связи с этим указанное требование отпадает и на коэффициенты преобразования (80,2) не налагается теперь никаких дополнительных (помимо (80,3)) условий. Четыре комплексные величины, связанные лишь одним условием (80,3), эквивалентны $8-2=6$ вещественным параметрам — в соответствии с числом параметров преобразований группы Лоренца.

Таким образом, преобразование (80,2) и комплексно сопряженное с ним преобразование оказываются существенно различными. Это значит, что в релятивистской теории существует два типа спиноров. Чтобы различить эти два типа, приняты специальные обозначения: индексы компонент спинора, преобразующегося по формулам, комплексно сопряженным с (80,2), записываются в виде цифр с точками над ними (*пунктирные индексы*):

$$\eta = \begin{pmatrix} \eta^i \\ \eta^{\dot{i}} \end{pmatrix}. \quad (80,6)$$

При этом соответствие между законами преобразования этого спинора и спинора ξ^* устанавливается правилом

$$\eta^i \sim \xi^{2*}, \quad \eta^{\dot{i}} \sim -\xi^{1*} \quad (80,7)$$

(знак $\sim$ означает здесь и ниже в этом параграфе слова «преобразуется как»).

Как уже было сказано, в группу Лоренца входят, в частности, и чисто пространственные вращения — повороты трехмерной системы координат. По отношению к этим преобразованиям 4-спиноры ведут себя так же, как и трехмерные спиноры. При этом, естественно, разница между пунктирными и непунктирными 4-спинорами исчезает: те и другие преобразуются одинаковым образом. В этом, кстати, состоит и смысл определения пунктирных 4-спиноров именно по правилу (80,7). Действительно, комплексно сопряженный трехмерный спинор преобразуется (как мы знаем из § 41) по правилу $\xi^{1*} \sim \xi^2$, $\xi^{2*} \sim -\xi^1$; сравнение с (80,7) показывает, следовательно, что по отношению к пространственным вращениям будет и

$$\eta^i \sim \xi^1, \quad \eta^{\dot{i}} \sim \xi^2. \quad (80,8)$$

4-спиноры высших рангов определяются как совокупности величин, преобразующихся как произведения компонент нескольких спиноров 1-го ранга. При этом среди индексов спинора высшего ранга могут быть как пунктирные, так и непунктирные. Так, существует три типа спиноров 2-го ранга ¹⁾:

$$\xi^{\alpha\beta} \sim \xi^{\alpha}\Xi^{\beta}, \quad \xi^{\alpha\dot{\beta}} \sim \xi^{\alpha}\eta^{\dot{\beta}}, \quad \eta^{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \sim \eta^{\dot{\alpha}}\Pi^{\dot{\beta}}. \quad (80,9)$$

Спинор 2-го ранга имеет $2 \cdot 2 = 4$ компоненты. Если оба его индекса одинаковы (оба пунктирные или оба непунктирные), то спинор можно разделить на симметричную и антисимметричную части: $\frac{1}{2}(\xi^{\alpha\beta} + \xi^{\beta\alpha})$ и $\frac{1}{2}(\xi^{\alpha\beta} - \xi^{\beta\alpha})$. Последняя имеет всего одну компоненту, $\frac{1}{2}(\xi^{12} - \xi^{21})$, представляющую собой скаляр (ср. со скаляром (80,4)). Симметричная же часть есть совокупность трех независимых величин (ξ^{11} , ξ^{22} , $\frac{1}{2}(\xi^{12} + \xi^{21})$), преобразующихся друг через друга при преобразованиях группы Лоренца.

Для спинора же «смешанного» характера, $\xi^{\alpha\dot{\beta}}$, порядок расположения индексов вообще условен, поскольку этим индексам соответствуют различные законы преобразования. Все четыре компоненты такого спинора преобразуются друг через друга, и это число не может быть уменьшено никаким выбором их линейных комбинаций. Четыре компоненты имеет также и 4-вектор, и эти компоненты тоже преобразуются друг через друга при преобразованиях группы Лоренца. Ясно поэтому, что между компонентами смешанного 4-спинора 2-го ранга и компонентами 4-вектора должно существовать определенное соответствие.

Это соответствие устанавливается такими формулами:

$$\begin{aligned} \xi^{1\dot{2}} &= a^3 + a^0, & \xi^{2\dot{1}} &= a^3 - a^0, \\ \xi^{11} &= -a^1 + ia^2, & \xi^{2\dot{2}} &= a^1 + ia^2, \end{aligned} \quad (80,10)$$

где $a^{\mu} = (a^0, \mathbf{a})$ — некоторый 4-вектор. Справедливость этих формул очевидна из следующих соображений.

Как было отмечено выше, по отношению к пространственным вращениям исчезает различие между пунктирными и непунктирными спинорами, причем те и другие

¹⁾ Первыми буквами греческого алфавита ($\alpha, \beta, \dots$) мы обозначаем в §§ 80—82 спинорные индексы, пробегающие значения 1, 2.

ведут себя как трехмерные спиноры. Поэтому совокупность трех величин

$$\zeta^{11} = -a^1 + ia^2, \quad \zeta^{22} = a^1 + ia^2, \quad \frac{1}{2}(\zeta^{12} + \zeta^{21}) = a^3$$

должна вести себя как трехмерный симметричный спинор 2-го ранга и написанные формулы должны совпадать с установленным в § 41 соответствием между компонентами такого спинора и компонентами трехмерного вектора; сравнение с формулами (41,9) показывает, что это условие действительно выполнено.

Антисимметричная же комбинация $\zeta^{12} - \zeta^{21}$ преобразуется (при всех преобразованиях группы Лоренца) как разность $\xi^1\eta^2 - \xi^2\eta^1$; согласно определению (80,7) это эквивалентно соответствию

$$\zeta^{12} - \zeta^{21} \sim \xi^1\xi^{1*} + \xi^2\xi^{2*}.$$

Но такая сумма должна представлять собой временную компоненту 4-вектора, как это было указано выше в связи с (80,5). Это условие тоже выполняется: согласно (80,10) имеем

$$\frac{1}{2}(\zeta^{12} - \zeta^{21}) = a^0.$$

§ 81. Инверсия спиноров

При изложении (в § 41) трехмерной теории спиноров мы не рассматривали их поведения по отношению к операции пространственной инверсии, поскольку в нерелятивистской теории это не привело бы к каким-либо новым физическим результатам. Мы остановимся, однако, теперь на этом вопросе для лучшего уяснения последующего рассмотрения инверсионных свойств 4-спиноров.

Инверсия есть изменение направления пространственных координатных осей x , y , z на обратное. Произведя инверсию дважды, мы вернемся к исходной системе координат. В случае спиноров, однако, возвращение к первоначальному положению можно понимать в двух различных смыслах: как поворот системы на 0° или на 360° . Для спиноров эти два определения не эквивалентны, так как спинор $\psi = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{pmatrix}$ меняет знак при повороте на 360° . Поэтому воз-

можно две альтернативные концепции инверсии спиноров: двукратная инверсия должна оставлять спинор неизменным или менять его знак. Выбор одного из этих двух определений не отражается на излагаемых ниже физических результатах; выберем, для определенности, первое из них. Таким образом, будем полагать, что

$$\hat{P}^2 = +1. \quad (81,1)$$

Инверсия координат меняет знак полярных векторов, но оставляет неизменными аксиальные векторы. К последним относятся векторы момента, в том числе вектор спина. Поэтому не меняется и значение z -проекции спина. Отсюда следует, что при инверсии каждая из компонент ψ^1, ψ^2 трехмерного спинора (отвечающая определенному значению s_z) может преобразовываться только сама через себя. В соответствии с определением (81,1) это значит, что

$$\hat{P}\psi^\alpha = \pm\psi^\alpha \quad (\alpha = 1, 2). \quad (81,2)$$

Подчеркнем, однако, что приписывание спинору той или иной определенной четности ($+1$ или -1) не имеет абсолютного смысла, поскольку спиноры меняют знак при повороте на 2π , который всегда можно произвести одновременно с инверсией. Но абсолютный характер имеет «относительная четность» двух спиноров ψ и φ , определяемая как четность составленного из них скаляра $\psi^1\varphi^2 - \psi^2\varphi^1$; поскольку при повороте на 2π меняют знак одновременно все спиноры, то связанная с этим неопределенность не отражается на четности (-1 или $+1$) указанного скаляра.

Обратимся теперь к четырехмерным спинорам.

Требование, чтобы преобразовывались друг через друга лишь величины, относящиеся к одинаковым значениям s_z , разумеется, остается в силе и здесь. Однако это не может быть уже просто преобразование (81,2) (и такое же для пунктирных спиноров), как это видно, например, из следующих соображений. Как следствие (81,2), преобразовывались бы только сами через себя также и компоненты 4-спиноров высших рангов. Но это противоречило бы формулам (80,10): при инверсии пространственных координат компоненты a^1, a^2, a^3 вектора (полярного) a меняют знак, а a^0 остается неизменной; поэтому ξ^{12} и ξ^{21} заведомо не могут преобразовываться сами через себя.

Таким образом, инверсия должна преобразовывать компоненты 4-спинора ξ^a через другие величины. Таковыми могут быть лишь компоненты некоторого другого спинора η^a , не совпадающего по своим трансформационным свойствам с ξ^a . Снова понимая под инверсией операцию, удовлетворяющую условию (81,1), можно определить ее действие формулами

$$\hat{P}\xi^a = \eta^{\dot{a}}, \quad \hat{P}\eta^{\dot{a}} = \xi^a. \quad (81,3)$$

При двукратном повторении этой операции ξ^a и $\eta^{\dot{a}}$ переходят сами в себя, в согласии с определением (81,1).

Таким образом, включение инверсии в число допустимых преобразований симметрии требует одновременного рассмотрения пары спиноров ($\xi^a, \eta^{\dot{a}}$); такую пару называют *биспинором*.

§ 82. Уравнение Дирака

Наиболее важен случай спина $\frac{1}{2}$, к которому относится большинство элементарных частиц. Как это ясно из сказанного выше, волновая функция, описывающая такие частицы в релятивистской теории, является биспинором; она представляет собой совокупность четырех компонент, вместо двух компонент спинорной волновой функции в нерелятивистской теории. Построим волновое уравнение, которому должна удовлетворять биспинорная волновая функция свободной частицы.

Из тех же соображений, которые были изложены в § 79, заранее очевидно, что каждая из компонент волновой функции при воздействии оператора $\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu$ должна умножаться на m^2 , т. е. будет удовлетворять уравнению Клейна — Фока. Заранее очевидно, однако, что в данном случае это уравнение заведомо недостаточно. Действительно, из четырех компонент биспинорной волновой функции только две могут быть линейно независимыми, — соответственно числу значений, которые может принимать проекция спина $\frac{1}{2}$. Поэтому полная система волновых уравнений должна представлять собой линейную дифференциальную связь между компонентами биспинора, осуществляемую с помощью оператора $\hat{p}_\mu = i\partial/\partial x^\mu$, причем эта связь должна, конечно, выражаться релятивистски инвариантными соотношениями.

Поскольку волновая функция представляет собой совокупность двух спиноров (обозначим их ξ^a и η^a), то для достижения поставленной цели естественно ввести и вместо 4-вектора $\hat{p}^a$ эквивалентный ему (согласно (80,10)) операторный спинор 2-го ранга $\hat{p}^{a\dot{b}}$ с компонентами

$$\begin{aligned}\hat{p}^{1\dot{2}} &= \hat{p}^3 + \hat{p}^0, & \hat{p}^{2\dot{1}} &= \hat{p}^3 - \hat{p}^0, \\ \hat{p}^{1\dot{1}} &= -\hat{p}^1 + i\hat{p}^2, & \hat{p}^{2\dot{2}} &= \hat{p}^1 + i\hat{p}^2.\end{aligned}\quad (82,1)$$

Подеиствуем оператором $\hat{p}^{a\dot{b}}$ на спинор ξ^a , образовав (по правилу (80,4)) скалярное произведение по паре непунктирных индексов:

$$\hat{p}^{1\dot{2}}\xi_2 - \hat{p}^{2\dot{1}}\xi_1.$$

Это произведение остается еще спинором 1-го ранга по пунктирному индексу; поэтому оно может выражаться лишь через пунктирный же спинор $\eta^{\dot{b}}$. Таким образом, получаем уравнение

$$\hat{p}^{1\dot{2}}\xi_2 - \hat{p}^{2\dot{1}}\xi_1 = m\eta^{\dot{b}}, \quad (82,2a)$$

где m — постоянная (оказывающаяся, как будет видно из дальнейшего, массой частицы). Аналогичным образом, подействовав оператором $\hat{p}^{a\dot{b}}$ на спинор $\eta^{\dot{b}}$ и образовав скалярное произведение по паре пунктирных индексов, получим уравнение

$$\hat{p}^{a\dot{2}}\eta^{\dot{1}} - \hat{p}^{a\dot{1}}\eta^{\dot{2}} = m\xi^a. \quad (82,26)$$

Релятивистская инвариантность этих уравнений автоматически обеспечивается спинорной формой их записи: в обеих сторонах каждого из уравнений стоят спиноры одинакового (пунктирного или непунктирного) характера, преобразующиеся при преобразованиях Лоренца по одинаковым законам.

Релятивистское волновое уравнение, изображающееся системой (82,2), называется *уравнением Дирака* для свободной частицы (оно было установлено *Полем Дираком* в 1928 г.).

Раскрыв уравнения (82,2) подстановкой в них выражений (82,1) для компонент оператора $\hat{p}^{ab}$, получим

$$\left. \begin{aligned} \hat{p}_0 \xi^1 - \hat{p}_x \xi^2 + i \hat{p}_y \xi^2 - \hat{p}_z \xi^1 &= m \eta^1, \\ \hat{p}_0 \xi^2 - \hat{p}_x \xi^1 - i \hat{p}_y \xi^1 + \hat{p}_z \xi^2 &= m \eta^2, \\ \hat{p}_0 \eta^1 + \hat{p}_x \eta^2 - i \hat{p}_y \eta^2 + \hat{p}_z \eta^1 &= m \xi^1, \\ \hat{p}_0 \eta^2 + \hat{p}_x \eta^1 + i \hat{p}_y \eta^1 - \hat{p}_z \eta^2 &= m \xi^2, \end{aligned} \right\} \quad (82,3)$$

где $\hat{p}_0 = i\partial/\partial t$, а $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ — три компоненты операторного вектора $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$.

Для свободной частицы, движущейся с определенным импульсом $\mathbf{p}$ и энергией ϵ , все компоненты волновой функции пропорциональны множителю $e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - \epsilon t)}$ (плоская волна). Воздействие оператора $\hat{p}_0$ умножает такую функцию на ϵ , а воздействие оператора $\hat{\mathbf{p}}$ — на $\mathbf{p}$. В результате система дифференциальных уравнений (82,3) сведется к системе однородных линейных алгебраических уравнений:

$$\left. \begin{aligned} (\epsilon - p_z) \xi^1 - (p_x - i p_y) \xi^2 &= m \eta^1, \\ -(p_x + i p_y) \xi^1 + (\epsilon + p_z) \xi^2 &= m \eta^2, \\ (\epsilon + p_z) \eta^1 + (p_x - i p_y) \eta^2 &= m \xi^1, \\ (p_x + i p_y) \eta^1 + (\epsilon - p_z) \eta^2 &= m \xi^2. \end{aligned} \right\} \quad (82,4)$$

Каждая из двух пар этих уравнений определяет две компоненты биспинора по заданным двум другим компонентам. Для того чтобы эти две пары уравнений были совместны друг с другом, результат подстановки, например, η^1 и η^2 из первой пары во вторую должен приводить к тождеству. Легко убедиться, что для этого должно быть

$$\epsilon^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = \epsilon^2 - \mathbf{p}^2 = m^2,$$

что как раз отвечает релятивистскому выражению энергии частицы через ее импульс, если m — масса частицы. Тем самым выясняется смысл введенной в уравнения (82,2) постоянной m .

Тот факт, что из четырех компонент биспинорной волновой функции свободной частицы лишь две могут быть заданы произвольно, находится в соответствии с тем, что при заданном импульсе состояния частицы могут отличаться еще проекцией спина, принимающей всего два различных значения.

В нерелятивистском предельном случае малых скоростей частица должна описываться всего одной двухкомпонентной величиной — трехмерным спинором. Когда скорость $\mathbf{v} \rightarrow 0$, импульс $\mathbf{p}$ тоже стремится к нулю, а энергия ϵ стремится к энергии покоя m (mc^2 в обычных единицах). Из уравнений (82,4) имеем тогда $\xi^\alpha = \eta^\alpha$, т. е. оба спинора, составляющих биспинор, действительно становятся одинаковыми.

Две пары уравнений (82,3) можно записать в более кратком виде с помощью матриц Паули:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (82,5)$$

(которые были уже введены в § 40). Если объединить эти три матрицы в «матричный вектор» $\boldsymbol{\sigma}$, то краткая запись двух пар уравнений (82,3) будет

$$(\hat{p}_0 - \hat{\mathbf{p}}\boldsymbol{\sigma})\xi = m\eta, \quad (\hat{p}_0 + \hat{\mathbf{p}}\boldsymbol{\sigma})\eta = m\xi. \quad (82,6)$$

При перемножении матриц Паули с двухкомпонентными величинами ξ или η подразумевается, как всегда, умножение по обычному матричному правилу: строки матрицы перемножаются со столбцом ξ или η ; например,

$$\sigma_y \xi = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\xi^2 \\ i\xi^1 \end{pmatrix} \text{ и т. п.}$$

§ 83. Матрицы Дирака

Спинорная форма записи уравнения Дирака естественна в том смысле, что она непосредственно выявляет его релятивистскую инвариантность. Но после того как вид уравнения таким образом установлен, можно с равным правом выбрать в качестве четырех независимых компонент волновой функции какие-либо другие линейно независимые комбинации первоначальных компонент. При оперировании с уравнением Дирака фактически обычно удобнее иметь дело именно с наиболее общей формой его записи, в которой способ выбора компонент волновой функции не предпринимается.

Будем обозначать четырехкомпонентную волновую функцию символом Ψ , с компонентами Ψ_i , нумеруемыми

индексом $i=1, 2, 3, 4$; ее можно изобразить столбиком ¹⁾

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}. \quad (83,1)$$

Систему же уравнений Дирака запишем в виде

$$\hat{p}_\mu \gamma_{ik}^\mu \Psi_k = m \Psi_i, \quad (83,2)$$

где $\gamma^\mu (\mu=0, 1, 2, 3)$ — некоторые четырехрядные матрицы с элементами $\gamma_{ik}^\mu (i, k=1, 2, 3, 4)$; суммирование в левой стороне (83,2) производится как по матричному (биспинорному) индексу k , так и по 4-векторному индексу μ ²⁾. Матричные индексы обычно опускают, записывая уравнение в символическом виде

$$[\gamma^\mu \hat{p}_\mu - m] \Psi = 0, \quad (83,3)$$

где

$$\gamma^\mu \hat{p}_\mu = \hat{p}_0 \gamma^0 - \hat{\mathbf{p}} \boldsymbol{\gamma} = i \left(\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\gamma} \nabla \right), \quad (83,4)$$

а $\boldsymbol{\gamma}$ обозначает трехмерный «матричный вектор» с компонентами $\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3$. Запись Ψ в виде столбика (83,1) отвечает тому, что перемножение матриц γ^μ с Ψ в (83,3) производится по обычному матричному правилу: каждая строка в матрице

¹⁾ Для удобства выражений мы будем условно называть четырехкомпонентную величину Ψ биспинором не только в ее спинорном, но и в произвольном представлении. Соответственно будем называть биспинорным также и индекс, нумерующий ее компоненты.

²⁾ Приведем, для иллюстрации, выражения матриц γ^μ , отвечающих спинорному представлению волновой функции. Если $\Psi_1 = \xi^1$, $\Psi_2 = \xi^2$, $\Psi_3 = \eta^1$, $\Psi_4 = \eta^2$, то

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

γ^μ перемножается со столбцом Ψ :

$$(\gamma^\mu \Psi)_i = \gamma_{ik}^\mu \Psi_k. \quad (83,5)$$

Матрицы γ^μ называют *матрицами Дирака*. В общем случае произвольного представления волновой функции они должны удовлетворять лишь условиям, обеспечивающим равенство

$$(\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu) \Psi = m^2 \Psi,$$

— каждая компонента Ψ должна удовлетворять уравнению Клейна — Фока.

Для выяснения этих условий умножим уравнение (83,3) слева на $\gamma^\nu \hat{p}_\nu$. Имеем

$$(\gamma^\nu \hat{p}_\nu) (\gamma^\mu \hat{p}_\mu) \Psi = (\gamma^\nu \hat{p}_\nu) m \Psi = m^2 \Psi.$$

Поскольку все операторы $\hat{p}_\mu$ коммутативны, то произведение $\hat{p}_\mu \hat{p}_\nu$ — симметричный тензор: $\hat{p}_\mu \hat{p}_\nu = \hat{p}_\nu \hat{p}_\mu$. Произведение же $\gamma^\nu \gamma^\mu$ разложим на симметричную и антисимметричную части:

$$\gamma^\nu \gamma^\mu = \frac{1}{2} (\gamma^\nu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\nu) + \frac{1}{2} (\gamma^\nu \gamma^\mu - \gamma^\mu \gamma^\nu).$$

При умножении на $\hat{p}_\nu \hat{p}_\mu$ последняя часть обратится в нуль, так что останется

$$\frac{1}{2} (\gamma^\nu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\nu) \hat{p}_\nu \hat{p}_\mu \Psi = m^2 \Psi.$$

Для того чтобы оператор в левой стороне равенства сводился к $\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu$, все пары матриц с $\mu \neq \nu$ должны быть антикоммутативны ($\gamma^\mu \gamma^\nu = -\gamma^\nu \gamma^\mu$), а квадраты матриц должны быть равны:

$$(\gamma^1)^2 = (\gamma^2)^2 = (\gamma^3)^2 = 1, \quad (\gamma^0)^2 = -1 \quad (83,6)$$

(единицу в правых сторонах равенств надо понимать, конечно, как единичную матрицу). Все эти условия вместе можно записать в виде

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}, \quad (83,7)$$

где $g^{\mu\nu}$ — так называемый метрический тензор с компонентами

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (83,8)$$

Равенства (83,7) определяют все свойства матриц Дирака, необходимые для оперирования с ними. Прибегать к конкретным выражениям этих матриц в том или ином конкретном представлении обычно не приходится.

Уравнение Дирака может быть представлено в виде, разрешенном относительно производной по времени, и тем самым для частиц со спином $\frac{1}{2}$ оказывается возможным ввести понятие о гамильтониане. Действительно, умножив уравнение

$$(\gamma^\mu \hat{p}_\mu - m) \Psi = i\gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \boldsymbol{\gamma} \hat{\mathbf{p}} \Psi - m\Psi = 0$$

слева на γ^0 , мы обратим коэффициент при $i\partial\Psi/\partial t$ в единицу (точнее — в единичную матрицу). Таким образом, получим

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\gamma^0 \boldsymbol{\gamma} \hat{\mathbf{p}} + m\gamma^0) \Psi.$$

Оператор, действующий на Ψ в правой стороне этого уравнения, и является гамильтонианом частицы. Обычно его записывают в виде

$$\hat{H} = \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + m\beta, \quad (83,9)$$

вводя специальные обозначения для матриц: $\boldsymbol{\alpha} = \gamma^0 \boldsymbol{\gamma}$, $\beta = \gamma^0$. Легко убедиться (с помощью соотношений (83,7)), что квадрат оператора (83,9) равен, как и следовало,

$$\hat{H}^2 = \hat{\mathbf{p}}^2 + m^2.$$

В этом смысле можно сказать, что выражение (83,9) представляет собой квадратный корень, извлеченный из суммы $\hat{\mathbf{p}}^2 + m^2$!

В конце предыдущего параграфа было отмечено, что в предельном случае малых скоростей два спинора ξ и η , составляющих биспинор Ψ , становятся одинаковыми. Здесь, однако, проявляется некоторый недостаток спинорной формы записи уравнения Дирака: при предельном переходе

остаются отличными от нуля все четыре компоненты волновой функции, хотя в действительности лишь две из них независимы. Поэтому может оказаться более удобным такое представление волновой функции, при котором две из ее компонент обращаются в пределе в нуль.

Эта цель достигается введением вместо ξ и η их линейных комбинаций

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi + \eta), \quad \chi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi - \eta), \quad (83,10)$$

или (в более подробной записи)

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \xi^1 + \eta^1 \\ \xi^2 + \eta^2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \xi^1 - \eta^1 \\ \xi^2 - \eta^2 \end{pmatrix}.$$

Тогда для покоящейся частицы $\chi=0$. Представление Ψ , в котором ее четырьмя компонентами являются $\varphi_1, \varphi_2, \chi_1, \chi_2$, называют *стандартным*. Мы воспользуемся им в § 93 при изучении движения электрона во внешнем поле, а сейчас напомним уравнение Дирака в этом представлении для свободной частицы. Складывая и вычитая почленно уравнения (82,6), получим

$$\begin{aligned} \hat{p}_0 \varphi - \hat{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma} \chi &= m \varphi, \\ -\hat{p}_0 \chi + \hat{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma} \varphi &= m \chi. \end{aligned} \quad (83,11)$$

§ 84. Плотность тока в уравнении Дирака

Построим величины, играющие для уравнения Дирака роль плотности частиц ρ и плотности их потока $\mathbf{j}$. В релятивистской теории эти величины образуют 4-вектор $j^\mu = (\rho, \mathbf{j})$. Они удовлетворяют уравнению непрерывности, которое в четырехмерном виде записывается как

$$\frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} = 0 \quad (84,1)$$

(ср. I § 55). Это уравнение выражает собой закон сохранения величины

$$Q = \int \rho dV. \quad (84,2)$$

В нерелятивистской теории это есть просто закон сохранения числа частиц; в релятивистской же теории смысл

выражаемого уравнением (84,1) закона меняется, как будет выяснено в § 86.

Величины j^μ представляют собой выражения, билинейные по волновой функции Ψ и ее комплексно сопряженной Ψ^* . Поэтому для нахождения этих выражений надо предварительно выяснить вид уравнения, которому подчиняется функция Ψ^* . Сама волновая функция удовлетворяет уравнению Дирака:

$$(p_\mu \gamma^\mu - m) \Psi = \left(i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\boldsymbol{\gamma} \nabla - m \right) \Psi = 0. \quad (84,3)$$

Комплексное сопряжение дает

$$\left(-i\gamma^{0*} \frac{\partial}{\partial t} - i\boldsymbol{\gamma}^* \nabla - m \right) \Psi^* = 0.$$

Из приведенных в примечании на стр. 290 выражений матриц γ^μ видно, что

$$\gamma^{0+} \equiv \tilde{\gamma}^{0*} = \gamma^0, \quad \boldsymbol{\gamma}^+ = -\boldsymbol{\gamma}, \quad (84,4)$$

т. е. матрица γ^0 — эрмитова, а матрицы $\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3$ — «анти-эрмитовы» (напомним, что знак $\sim$ означает транспонирование, т. е. перестановку столбцов и строк матрицы)¹⁾.

Поэтому $\gamma^{0*} = \tilde{\gamma}^0$, $\boldsymbol{\gamma}^* = -\tilde{\boldsymbol{\gamma}}$, так что

$$\left(-i\tilde{\gamma}^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\tilde{\boldsymbol{\gamma}} \nabla - m \right) \Psi^* = 0.$$

Для возвращения к исходным (не транспонированным) матрицам замечаем, что

$$\tilde{\gamma}^\mu \Psi^* \equiv \tilde{\gamma}_{kl}^\mu \Psi_k^* = \Psi_k^* \gamma_{kl}^\mu \equiv \Psi^* \gamma^\mu;$$

в символической (без матричных индексов) записи $\Psi^* \gamma^\mu$ надо понимать Ψ^* как строку

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

перемножаемую со столбцами матриц γ^μ . Таким образом, находим

$$\Psi^* \left(-i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\boldsymbol{\gamma} \nabla - m \right) = 0,$$

¹⁾ Выражения на стр. 290 относятся к конкретному (спинорному) представлению матриц, но свойства (84,4) в действительности от представления не зависят.

где условно подразумевается, что операторы дифференцирования действуют на функцию Ψ^* , стоящую слева от них. Ввиду разницы в знаках первого и второго члена в скобках, они не могут еще быть сведены к четырехмерному виду. Для устранения этого недостатка умножим все уравнение справа на γ^0 и, заменив $\gamma\gamma^0 = -\gamma^0\gamma$, получим

$$\Psi^*\gamma^0 \left(i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\gamma\nabla + m \right) = 0.$$

Функция $\Psi^*\gamma^0$ называется *дираковски сопряженной* по отношению к функции Ψ и обозначается буквой с чертой над ней:

$$\bar{\Psi} = \Psi^*\gamma^0, \quad \Psi^* = \bar{\Psi}\gamma^0. \quad (84,5)$$

Таким образом, окончательно имеем

$$\bar{\Psi} (\hat{p}_\mu \gamma^\mu + m) = 0. \quad (84,6)$$

Теперь нетрудно найти выражение для плотности потока как 4-вектора, удовлетворяющего уравнению непрерывности (84,1). Для этого умножим уравнение (84,6) справа на Ψ , уравнение (84,3) слева на Ψ^* и сложим их почленно. Члены $\pm m\Psi^*\Psi$ при этом взаимно сокращаются и остается

$$i \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x^\mu} \gamma^\mu \Psi + i \bar{\Psi} \gamma^\mu \frac{\partial \Psi}{\partial x^\mu} = i \frac{\partial}{\partial x^\mu} (\bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi) = 0.$$

Это равенство действительно имеет вид уравнения непрерывности, в котором роль плотности тока играет 4-вектор

$$j^\mu = \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi \quad (84,7)$$

(в полной записи с матричными индексами: $j^\mu = \bar{\Psi}_i \gamma^\mu_{ik} \Psi_k$).

Временная компонента 4-вектора (84,7) есть плотность частиц

$$\rho = \bar{\Psi} \gamma^0 \Psi = \Psi^* \Psi \equiv |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + |\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2, \quad (84,8)$$

а три пространственные компоненты образуют трехмерный вектор тока

$$\mathbf{j} = \bar{\Psi} \boldsymbol{\gamma} \Psi = \Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi, \quad (84,9)$$

где $\boldsymbol{\alpha} = \gamma^0 \boldsymbol{\gamma}$ — «матричный вектор», введенный уже в (83,9). Обратим внимание на то, что $\boldsymbol{\alpha}$ играет здесь роль оператора скорости частицы.

Применим (84,7) для нормировки плоской волны — волновой функции состояния свободной частицы с определенными значениями импульса $\mathbf{p}$ и энергии ε . Имея в виду произвести нормировку на «одну частицу в объеме Ω », запишем волну в виде

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} u(p) e^{-i(\varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r})}; \quad (84,10)$$

амплитуда волны $u(p) \equiv u(\varepsilon, \mathbf{p})$ — постоянный биспинор, зависящий от 4-импульса частицы. Компоненты этого биспинора удовлетворяют системе алгебраических уравнений

$$(\gamma^\mu p_\mu - m) u = 0, \quad (84,11)$$

получающейся при подстановке (84,10) в уравнение Дирака (84,3) (что сводится просто к замене в нем операторов p_μ величинами p_μ). Покажем, что требуемая нормировка функции (84,10) будет достигнута, если нормировать амплитуду $u(p)$ условием

$$\bar{u}u = \frac{m}{\varepsilon}. \quad (84,12)$$

Действительно, умножив уравнение (84,11) слева на $\bar{u}$, получим

$$(\bar{u}\gamma^\mu u) p_\mu = m(\bar{u}u) = \frac{m^2}{\varepsilon}.$$

Отсюда видно, что $\bar{u}\gamma^\mu u = p^\mu/\varepsilon$, так что 4-вектор тока

$$j^\mu = \bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi = \frac{1}{\Omega} \bar{u}\gamma^\mu u = \frac{p^\mu}{\Omega\varepsilon}. \quad (84,13)$$

При этом плотность частиц $\rho = p^0/\varepsilon\Omega = 1/\Omega$, что и соответствует требуемой нормировке. Трехмерная же плотность потока: $\mathbf{j} = \mathbf{p}/\varepsilon\Omega = \mathbf{v}/\Omega$, где $\mathbf{v}$ — скорость частиц.

Глава XIII

ЧАСТИЦЫ И АНТИЧАСТИЦЫ

§ 85. Ψ -операторы

В гл. XI было показано, каким образом можно построить квантовое описание свободного электромагнитного поля, отталкиваясь от известных свойств поля в классическом пределе и опираясь на представления обычной квантовой механики. Получающаяся таким образом схема описания поля как системы фотонов несет в себе многие черты, которые переносятся и на релятивистское описание частиц в квантовой теории.

Электромагнитное поле представляет собой систему с бесконечным числом степеней свободы. Для нее не существует закона сохранения числа частиц (фотонов), и в ряду его возможных состояний имеются состояния с произвольным числом частиц ¹⁾. Но таким же свойством должны, вообще говоря, обладать в релятивистской теории также и системы любых частиц. Сохранение числа частиц в нерелятивистской теории связано с законом сохранения массы: сумма масс (масс покоя) частиц не меняется при их взаимодействии; сохранение же суммы масс в системе частиц означает неизменность также и их числа. В релятивистской же теории сохранения массы не существует; должна сохраняться лишь полная энергия системы (включающая в себя как часть также и энергию покоя частиц). Поэтому число частиц уже не должно сохраняться, и тем самым всякая релятивистская теория частиц должна быть теорией с бесконечным числом степеней свободы. Другими словами, такая теория частиц приобретает характер теории поля.

¹⁾ Фактически, разумеется, число фотонов меняется лишь в результате различных процессов взаимодействия.

Адекватным математическим аппаратом для описания систем с переменным числом частиц является аппарат вторичного квантования, в котором независимыми переменными являются числа заполнения различных состояний частицы. В квантовом описании электромагнитного поля в роли оператора вторичного квантования выступает потенциал поля $\hat{A}$. Он выражается через волновые функции отдельных фотонов и операторы их рождения и уничтожения. Аналогичную роль в описании системы частиц играет оператор квантованной волновой функции.

Излагаемые в этом параграфе соображения относятся в равной степени к частицам с любым спином. Поэтому мы не будем уточнять математической природы волновых функций. Так, мы будем писать плоские волны в виде

$$\Psi_p = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} u(p) e^{-i(\epsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}, \quad (85,1)$$

подразумевая, что амплитуда волны $u(p)$ (функция 4-импульса) может быть скаляром (для частиц со спином 0), биспинором (для частиц со спином $\frac{1}{2}$) и т. п.

Следуя общим правилам проведения вторичного квантования, мы должны рассмотреть разложение произвольной волновой функции по собственным функциям полного набора возможных состояний свободной частицы — по плоским волнам Ψ_p ¹⁾:

$$\Psi = \sum_p a_p \Psi_p, \quad \Psi^* = \sum_p a_p^* \Psi_p^*.$$

После этого коэффициенты a_p , a_p^* надо было бы понимать как операторы $\hat{a}_p$, $\hat{a}_p^+$ уничтожения и рождения частиц в соответствующих состояниях.

При этом, однако, мы сразу сталкиваемся со следующим новым (по сравнению с нерелятивистской теорией) принципиальным обстоятельством. Для того чтобы плоская волна (85,1) удовлетворяла волновому уравнению, должно быть соблюдено лишь условие $\epsilon^2 = \mathbf{p}^2 + m^2$ для квадрата энергии; само же ϵ может при этом иметь два значения: $\epsilon = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$. Но физическим смыслом энергии свободной частицы могут

¹⁾ Для частиц со спином суммирование должно производиться также и по поляризациям частицы; соответствующий индекс для краткости не выписываем.

обладать лишь положительные значения ε . Между тем просто опустить отрицательные значения недопустимо: общее решение волнового уравнения образует лишь суперпозиция всех его независимых частных решений. Это обстоятельство указывает на необходимость некоторого изменения истолкования коэффициентов разложения Ψ и Ψ^* при вторичном квантовании.

Напишем это разложение в виде

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(+)} u(\varepsilon, \mathbf{p}) e^{-i(\varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r})} + \\ + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(-)} u(-\varepsilon, \mathbf{p}) e^{i(\varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r})}, \quad (85,2)$$

где в первой сумме стоят плоские волны с положительными, а во второй — с отрицательными «частотами»; ε везде обозначает положительную величину: $\varepsilon = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$. При вторичном квантовании коэффициенты $a_{\mathbf{p}}^{(+)}$ в первой сумме заменяем обычным образом операторами уничтожения частиц $\hat{a}_{\mathbf{p}}$.

Во второй же сумме прежде всего заменяем обозначение переменной суммирования $\mathbf{p}$ на $-\mathbf{p}$; поскольку суммирование производится по всем возможным значениям $\mathbf{p}$, то как область суммирования, так и величина суммы от такой замены, разумеется, не меняются. После замены экспоненциальный множитель под знаком суммы принимает вид $e^{i(\varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r})}$, совпадающий с видом комплексно сопряженных волновых функций $\Psi_{\mathbf{p}}^*$ с «положительными» частотами. Такие функции должны умножаться, при вторичном квантовании, на операторы рождения частиц. Соответственно этому, заменяем коэффициенты $a_{\mathbf{p}}^{(-)}$ на операторы $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+$ рождения некоторых других частиц — вообще говоря, отличных от тех, к которым относятся операторы $\hat{a}_{\mathbf{p}}$. В результате получим Ψ-операторы в виде

$$\hat{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} \{ \hat{a}_{\mathbf{p}} u(\mathbf{p}) e^{-i(\varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r})} + \hat{b}_{\mathbf{p}}^+ u(-\mathbf{p}) e^{i(\varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r})} \}, \quad (85,3) \\ \hat{\Psi}^+ = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} \{ \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ u^*(\mathbf{p}) e^{i(\varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r})} + \hat{b}_{\mathbf{p}} u^*(-\mathbf{p}) e^{-i(\varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r})} \}$$

(обозначено $u(-\mathbf{p}) \equiv u(-\varepsilon, -\mathbf{p})$).

Таким образом, все операторы $\hat{a}_p, \hat{b}_p$ оказываются умноженными на функции с «правильной» зависимостью от времени ($\sim e^{-i\epsilon t}$), а операторы $\hat{a}_p^+, \hat{b}_p^+$ — на комплексно сопряженные им функции. Это и дает возможность истолковать, в соответствии с общими правилами, операторы $\hat{a}_p^+, \hat{b}_p^+$ как операторы уничтожения, а операторы $\hat{a}_p, \hat{b}_p$ — как операторы рождения частиц с импульсами p и энергиями ϵ .

Мы приходим к представлению о частицах двух родов, выступающих совместно и равноправно. О них говорят как о *частицах* и *античастицах* (смысл такого названия выяснится в следующем параграфе). Одним из них отвечают в аппарате вторичного квантования операторы $\hat{a}_p, \hat{a}_p^+$, а другим — $\hat{b}_p, \hat{b}_p^+$. Оба вида частиц, операторы которых входят в один и тот же Ψ -оператор, удовлетворяющий одному и тому же волновому уравнению, тем самым имеют одинаковые массы.

§ 86. Частицы и античастицы

Для дальнейшего выяснения свойств и взаимоотношения частиц и античастиц необходимо составить выражения для операторов полной энергии и полного числа частиц в системе. Ход вывода этих выражений зависит от спина частиц; рассмотрим поле частиц со спином $\frac{1}{2}$ (или, как говорят, *спиновое поле*).

Все, что достаточно в данном случае знать для вывода искомых выражений, это — что для частиц, описываемых уравнением Дирака, существует гамильтониан и что роль плотности частиц играет произведение $\Psi^*\Psi$. Эти обстоятельства позволяют сразу воспользоваться результатами, полученными в §§ 47, 48, в рамках нерелятивистской теории (в которой оба указанных свойства имеют место для частиц любого спина)¹⁾.

Мы видели, что в математическом аппарате вторичного квантования гамильтониан системы частиц $\hat{H}$ получается

¹⁾ Напомним в то же время (§ 79), что для релятивистских частиц со спином 0, описываемых скалярным уравнением Клейна — Фока, ни одно из этих свойств не справедливо!

из гамильтониана одной частицы $\hat{H}^{(1)}$ как интеграл ¹⁾

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^+ \hat{H}^{(1)} \hat{\Psi} dV. \quad (86,1)$$

В нерелятивистской теории это приводило к тривиальному результату. При подстановке Ψ -операторов

$$\hat{\Psi} = \sum_p \hat{a}_p \Psi_p, \quad \hat{\Psi}^+ = \sum_p \hat{a}_p^+ \Psi_p^*, \quad (86,2)$$

вне зависимости от правил коммутации операторов $\hat{a}_p, \hat{a}_p^+$, получалось

$$\hat{H} = \sum_p \epsilon_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p, \quad (86,3)$$

где ϵ_p — собственные значения гамильтониана $\hat{H}^{(1)}$, т. е. энергии свободной частицы. Собственные же значения операторных произведений $\hat{a}_p^+ \hat{a}_p$ есть числа заполнения состояний N_p ; поэтому собственные значения полной энергии системы оказывались равными очевидному выражению $E = \sum_p \epsilon_p N_p$.

Аналогичным образом получался тривиальный результат и для полного числа частиц в системе, оператор которого дается интегралом

$$\hat{N} = \int \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} dV. \quad (86,4)$$

При подстановке сюда Ψ -операторов (86,2) получалось

$$\hat{N} = \sum_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p, \quad (86,5)$$

так что собственные значения $N = \sum_p N_p$.

В релятивистской же теории существование у гамильтониана частицы $\hat{H}^{(1)}$ отрицательных собственных значений меняет ситуацию радикальным образом. Вместо (86,3) получается теперь

$$\hat{H} = \sum_p \epsilon_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p - \sum_p \epsilon_p \hat{b}_p \hat{b}_p^+. \quad (86,6)$$

Первая сумма отвечает положительным собственным значениям $\epsilon_p = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$; она имеет такой же вид, как и сумма (86,3). Вторая же сумма отвечает отрицательным собственным значениям, равным $-\epsilon_p$; отсюда — знак минус

¹⁾ Индекс (1) у гамильтониана частицы введен здесь для отличия его от гамильтониана всей системы.

перед этой суммой. Обратный же (по сравнению с первой суммой) порядок множителей $\hat{b}_p$ и $\hat{b}_p^+$ во второй сумме связан с тем, что в Ψ -операторах (85,3) вместе с $\hat{a}_p$ и $\hat{a}_p^+$ фигурируют соответственно $\hat{b}_p^+$ и $\hat{b}_p$. Аналогичным образом для оператора (86,4) (который обозначим теперь через $\hat{Q}$) получим вместо (86,5)

$$\hat{Q} = \sum_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \sum_p \hat{b}_p \hat{b}_p^+. \quad (86,7)$$

Для определения собственных значений операторов (86,6) и (86,7) необходимо предварительно привести порядок множителей во вторых суммах к стандартному: $\hat{b}_p^+ \hat{b}_p$; собственные значения именно таких произведений равны числам заполнения. Здесь, однако, становятся существенными правила коммутации, которым удовлетворяют операторы рождения и уничтожения частиц.

Легко видеть, что разумный результат для собственных значений гамильтониана (86,6) получится, лишь если эти операторы удовлетворяют правилам коммутации Ферми:

$$\begin{aligned} a_p a_p^+ + a_p^+ a_p &= 1, \\ b_p b_p^+ + b_p^+ b_p &= 1. \end{aligned} \quad (86,8)$$

Действительно, в таком случае гамильтониан (86,6) принимает вид

$$\hat{H} = \sum_p \varepsilon_p (\hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \hat{b}_p^+ \hat{b}_p - 1).$$

Собственные значения произведений $a_p^+ a_p$ и $b_p^+ b_p$ равны положительным целым числам N_p и $\bar{N}_p$ — числам частиц и античастиц в соответствующих состояниях. Бесконечную же аддитивную постоянную — $\sum_p \varepsilon_p$ («энергию вакуума») можно просто опустить — как это было сделано по такому же поводу в случае фотонов (§ 77). Тогда для энергии системы получится существенно положительное выражение:

$$E = \sum_p \varepsilon_p (N_p + \bar{N}_p), \quad (86,9)$$

что как раз соответствует представлению о двух родах реально существующих частиц: полная энергия системы равна сумме энергий всех составляющих ее частиц и античастиц.

Если же мы приняли бы вместо (86,8) правила коммутации Бозе (коммутаторы вместо антикоммутаторов), то получили бы

$$\hat{H} = \sum_p \varepsilon_p (\hat{a}_p^+ \hat{a}_p - \hat{b}_p^+ \hat{b}_p + 1)$$

и вместо (86,9). — физически бессмысленное выражение $\sum \varepsilon_p (N_p - \bar{N}_p)$, не положительно определенное и потому не могущее представлять собой энергию системы свободных частиц.

Установив, таким образом, правила коммутации операторов уничтожения и рождения частиц, обратимся теперь к оператору (86,7). Изменив с помощью (86,8) порядок множителей во второй сумме, получим

$$\hat{Q} = \sum_p (\hat{a}_p^+ \hat{a}_p - \hat{b}_p^+ \hat{b}_p + 1).$$

Собственные значения этого оператора (снова за вычетом несущественной аддитивной постоянной $\sum 1$)

$$Q = \sum_p (N_p - \bar{N}_p), \quad (86,10)$$

т. е. равны разностям полных чисел частиц и античастиц.

Этот результат очень важен. Оператор $\hat{Q}$ отвечает той величине (84,2), закон сохранения которой выражается уравнением непрерывности (84,1). Мы видим теперь, что этот закон не требует сохранения числа частиц и числа античастиц по отдельности или же их суммы. Должна сохраняться лишь разность этих чисел. Другими словами, в процессах различных взаимодействий могут возникать и исчезать пары «частица — античастица» ¹⁾. Разумеется, все такие процессы должны происходить с соблюдением законов сохранения энергии и импульса всей системы взаимодействующих частиц. В частности, исчезновение пары при столкновении частицы с античастицей должно сопровождаться появлением каких-то других частиц, обеспечивающих сохранение энергии и импульса; таковыми могут быть фотоны, — в таком случае говорят об *аннигиляции* пары.

¹⁾ При этом подразумевается, конечно, что взаимодействие не нарушает сохранения величины Q . Все известные в природе взаимодействия удовлетворяют этому условию.

Если частица электрически заряжена, то ее античастица должна иметь заряд противоположного знака: если бы та и другая имели одинаковые заряды, то возникновение или уничтожение их пары противоречило бы строгому закону природы — сохранению полного электрического заряда.

Величину Q иногда называют *зарядом поля* данных частиц. Для электрически заряженных частиц Q определяет полный заряд системы (измеренный в единицах элементарного заряда e). Подчеркнем, однако, что частицы и античастицы могут быть и электрически нейтральными ¹⁾.

Таким образом, мы видим, как характер релятивистской зависимости энергии от импульса (двузначность корня уравнения $e^2 = \mathbf{p}^2 + m^2$) совместно с требованиями релятивистской инвариантности приводит в квантовой теории к появлению нового классификационного принципа для частиц — возможности существования пар различных частиц (частица — античастица), находящихся в описанном выше соответствии друг с другом. Это замечательное предсказание впервые было сделано *Дираком* в 1930 г. еще до фактического открытия первой античастицы — позитрона (антиэлектрон) ²⁾.

§ 87. Связь спина со статистикой

Изложенные в предыдущем параграфе результаты имеют еще и другой важный аспект: мы видели, что естественные физические требования автоматически приводят к тому, что частицы со спином $\frac{1}{2}$ подчиняются статистике Ферми.

Отсюда в свою очередь следует также и общее утверждение: все частицы с полуцелым спином являются фермионами, а частицы с целым спином (в том числе со спином 0) — бозонами ³⁾.

¹⁾ Среди фермионов таковы нейтроны и нейтрино (спин $1/2$). Среди бозонов таковы нейтральные K -мезоны (спин 0).

²⁾ Сам Дирак пришел к представлению о позитроне как о «дырке» в континууме занятых электронами состояний отрицательной энергии. Такое представление, однако, не только не может иметь, очевидно, буквального смысла, но не адекватно также и в том отношении, что понятие о частицах и античастицах относится в действительности к частицам любого спина, а не только к частицам с полуцелым спином, для которых справедлив принцип Паули.

³⁾ К частицам с целым спином относятся также и фотоны. Тот факт, что фотоны являются бозонами, был уже выяснен в § 77, исходя

Это становится очевидным, если заметить, что в отношении ее спиновых свойств всякую частицу с отличным от нуля спином s можно представить себе «составленной» из $2s$ частиц с параллельными спинами $\frac{1}{2}$ (а частицу со спином 0 — из двух частиц с антипараллельными спинами $\frac{1}{2}$). При полуцелом s число $2s$ нечетно, а при целом s — четно. Между тем «сложная» частица, составленная из нечетного числа фермионов, тоже является фермионом, а составленная из четного числа фермионов — является бозоном (об этом уже говорилось в § 45). Действительно, критерием той или иной статистики является поведение волновой функции системы частиц при перестановке любой пары из них: волновая функция меняет знак при перестановке фермионов и остается неизменной при перестановке бозонов. Перестановка двух частиц с полуцелым спином эквивалентна, согласно сказанному, одновременной перестановке нечетного числа пар фермионов со спином $\frac{1}{2}$ и потому меняет знак волновой функции. Перестановка же двух частиц с целым спином эквивалентна перестановке четного числа пар фермионов и потому не меняет знака волновой функции.

Специфика частиц со спином $\frac{1}{2}$, использованная в изложенном в предыдущем параграфе выводе, состояла лишь в существовании для них гамильтониана и в выражении $\Psi^*\Psi$ для плотности частиц. То и другое связано со спинорными свойствами волновых функций таких частиц и со свойствами уравнения Дирака, которому эти функции подчиняются. В свою очередь, все эти свойства по существу являются следствием одних лишь требований релятивистской инвариантности и изотропии пространства (т. е. следствием симметрии по отношению к преобразованиям группы Лоренца). В этом смысле можно сказать, что и связь спина со статистикой, которой подчиняются частицы, тоже является прямым следствием этих требований ¹⁾. Происхождение этой связи было впервые выяснено Паули (1940).

из аналогии с осцилляторами, т. е. по существу из свойств электромагнитного поля в классическом пределе.

¹⁾ Обобщение связи спина со статистикой со случая спина $\frac{1}{2}$ на частицы с произвольным спином обосновано выше рассмотрением «составных» частиц. Но к такому же результату можно было бы прийти и путем изучения математической структуры выражений, играющих для полей этих частиц роль операторов $\hat{H}$ и $\hat{Q}$, построенных в соответствии с требованиями релятивистской инвариантности.

§ 88. Истинно нейтральные частицы

При проведении вторичного квантования волновой функции (85,2) коэффициенты $a_p^{(+)}$ и $a_p^{(-)}$ заменялись операторами уничтожения и рождения различных частиц. Это, однако, не обязательно: как частный случай, входящие в $\hat{\Psi}$ операторы уничтожения и рождения могут относиться к одним и тем же частицам; необходимо лишь, чтобы у «положительно-частотных» волновых функций стояли операторы уничтожения, а у «отрицательно-частотных» — операторы рождения частиц. Обозначая в этом случае указанные операторы как $\hat{c}_p$ и $\hat{c}_p^+$, напомним Ψ -оператор в виде

$$\hat{\Psi} = \frac{1}{V\Omega} \sum_p \{ \hat{c}_p u(p) e^{-i(ef-pr)} + \hat{c}_p^+ u^*(-p) e^{i(ef-pr)} \}. \quad (88,1)$$

Описываемое таким Ψ -оператором поле соответствует системе одинаковых частиц, о которых можно сказать, что они «совпадают со своими античастицами».

Очевидно, что электрический заряд таких частиц во всяком случае должен быть равен нулю. Их называют *истинно нейтральными*, в отличие от электрически нейтральных частиц, имеющих античастицу.

Для истинно нейтральных частиц не существует закона сохранения «заряда» поля Q : тождественности частицы и античастицы отвечает тождественное совпадение чисел N_p и $\bar{N}_p$, так что величина (86,10) тождественно равна нулю. Ввиду отсутствия этого запрета истинно нейтральные частицы могут рождаться или аннигилировать (превращаясь в фотон) по одиночке, а не обязательно парами.

Среди «элементарных» частиц со спином 0 истинно нейтральны π^0 -мезоны. Пример истинно нейтральной «составной» частицы представляет *позитроний* — водородоподобная система из позитрона и электрона; спин позитрония может быть равен 0 или 1. Истинно нейтральные частицы с полуцелым спином в природе неизвестны.

Структура Ψ -оператора (88,1) — такая же, как структура оператора электромагнитного поля (76,15): в обоих случаях операторы уничтожения и рождения частиц входят в один и тот же оператор поля. В этом смысле можно сказать,

что и сами фотоны — истинно нейтральные частицы. Их рождение или уничтожение представляет собой обычное испускание или поглощение фотона системой заряженных частиц.

Наличие нового свойства симметрии приводит к появлению у частицы новой специфической характеристики, не имеющей аналога в нерелятивистской теории. Речь идет о так называемом преобразовании *зарядового сопряжения* — взаимной замене частиц и античастиц; оператор этого преобразования обозначают буквой $\hat{C}$. Если частица (или система частиц) не истинно нейтральна, то зарядовое сопряжение означает ее замену на другую физическую систему, — например, система электронов заменяется системой позитронов; никакой новой характеристики частицы как таковой отсюда не возникает. Но если частица (или система частиц) истинно нейтральна, то зарядовое сопряжение оставляет ее неизменной. В связи с этим можно говорить о поведении волновой функции системы при этом преобразовании, а тем самым и о собственных значениях оператора $\hat{C}$. Двукратное повторение зарядового сопряжения есть, очевидно, тождественное преобразование: $\hat{C}^2=1$. Как и для всякого оператора с этим свойством, его собственные значения $C=\pm 1$; эти значения называют *зарядовой четностью*. Если система обладает определенной зарядовой четностью, то это значит, что при зарядовом сопряжении ее волновые функции остаются неизменными или меняют знак (в первом случае говорят о зарядово четной, а во втором — о зарядово нечетной системе).

В качестве примера определим зарядовую четность упомянутого выше позитрония. Для описания зарядовой симметрии системы надо рассматривать частицу и античастицу (в данном случае — электрон и позитрон) как два различных «зарядовых состояния» одной и той же частицы, отличающихся значением «зарядового квантового числа» $Q=\pm 1$. Волновая функция системы представится как произведение орбитального (т. е. зависящего от координат частиц), спинного и «зарядового» множителей: $\Psi = \Psi_{\text{орб}} \Psi_{\text{спин}} \Psi_{\text{зар}}$.

Зарядовое сопряжение эквивалентно в данном случае перестановке обеих частиц. Перестановка же координат двух частиц, в свою очередь, эквивалентна инверсии (относительно точки, делящей пополам расстояние между частицами);

при этом $\Psi_{\text{орб}}$ умножается на $(-1)^l$, где l — орбитальный момент позитрония (см. (19,5)). Далее, спиновая функция симметрична по отношению к перестановке частиц, если их спины параллельны (полный спин $S=1$), и антисимметрична, если спины антипараллельны ($S=0$), — см. § 46; таким образом, $\Psi_{\text{спин}}$ умножается на $(-1)^{S+1}$. Наконец, $\Psi_{\text{зар}}$ умножается на искомое C .

С другой стороны, перестановка двух фермионов должна менять знак полной волновой функции Ψ . Другими словами, должно быть $(-1)^l(-1)^{S+1}C=-1$, откуда

$$C = (-1)^{l+S}. \quad (88,2)$$

Уровни со спином $S=0$ называют уровнями *парапозитрония*, а уровни со спином $S=1$ — уровнями *ортопозитрония*. В основном состоянии орбитальный момент $l=0$, поэтому основное состояние парапозитрония зарядово четно ($C=1$), а основное состояние ортопозитрония — зарядово нечетно ($C=-1$).

Позитроний — неустойчивое образование; образующие его электрон и позитрон в конце концов аннигилируют друг с другом. Зарядовая четность позитрония накладывает определенные ограничения на возможные способы такой аннигиляции. Мы увидим ниже, что фотон — зарядово нечетная частица (см. примечание на стр. 328). Поэтому, например, в основном состоянии парапозитрония ($C=1$) возможна аннигиляция с возникновением двух фотонов (зарядовая четность системы двух фотонов $C=(-1)(-1)=1$). Напротив, в основном состоянии ортопозитрония ($C=-1$) распад на два фотона невозможен, и позитроний аннигилирует с образованием трех фотонов ¹⁾.

Упомянутая выше элементарная частица, π^0 -мезон, тоже неустойчива и распадается на два фотона. Отсюда следует, что она зарядово четна; по этой же причине ее распад на нечетное число фотонов запрещен ²⁾.

¹⁾ Время жизни парапозитрония (т. е. величина, обратная вероятности его распада) составляет $1,2 \cdot 10^{-10}$ сек. Время жизни же ортопозитрония значительно больше ($1,4 \cdot 10^{-7}$ сек), ввиду меньшей вероятности распада на большее число фотонов.

²⁾ В этих рассуждениях молчаливо подразумевается, что зарядовая четность системы сохраняется. Мы вернемся к этому вопросу в § 90.

§ 89. Внутренняя четность частиц

Мы видели уже при изложении нерелятивистской квантовой теории, каким образом симметрия по отношению к инверсии пространственных координат приводит к появлению новой характеристики состояния частицы — его четности. Релятивистская теория вносит в это понятие еще и новый аспект.

Будем говорить сначала о частицах со спином 0, описывающихся скалярными волновыми функциями. Но скаляры могут быть двух родов, и различие между ними заключается именно в поведении при инверсии. Инверсия меняет знак координат в аргументах функции и, кроме того, может изменить или не изменить ее общий знак:

$$\hat{P} \Psi(t, \mathbf{r}) = \pm \Psi(t, -\mathbf{r}); \quad (89,1)$$

знак $+$ или $-$ в правой стороне отвечает соответственно истинному скаляру или псевдоскаляру.

Отсюда видно, что надо различать два аспекта в поведении волновой функции при инверсии. Один из них связан с зависимостью волновой функции от координат. В нерелятивистской квантовой механике рассматривался только этот аспект, — он приводит к понятию о четности состояния (которое мы будем теперь называть *орбитальной четностью*), характеризующей свойства симметрии движения частицы. Если состояние обладает определенной орбитальной четностью $+1$ или -1 , то это значит, что

$$\Psi(t, -\mathbf{r}) = \pm \Psi(t, \mathbf{r}).$$

Другой аспект — поведение (при инверсии координатных осей) волновой функции в заданной точке пространства (которую удобно представлять себе как начало координат). Оно приводит к понятию о *внутренней четности* частицы. Внутренней четности $+1$ или -1 отвечают (для частицы со спином 0) два знака в определении (89,1). Полная четность системы частиц дается произведением их внутренних четностей и орбитальной четности их относительного движения.

«Внутренние» свойства симметрии различных частиц проявляются, разумеется, лишь в процессах их взаимных превращений. Аналогом внутренней четности в нерелятивистской квантовой механике является четность связанного состояния сложной системы (например, ядра). С точки

зрения релятивистской теории, не делающей принципиального различия между составными и элементарными частицами, такая внутренняя четность не отличается от внутренней четности частиц, фигурирующих в нерелятивистской теории в качестве элементарных. В нерелятивистской области, где последние ведут себя как неизменяемые, их внутренние свойства симметрии не наблюдаемы, и поэтому их рассмотрение было бы лишено физического смысла.

Понятие внутренней четности естественно формулировать в системе покоя частицы. В этой системе волновая функция сводится к не зависящей от координат величине (волновая амплитуда u в функциях (85,1)). Для частиц со спином 0 эта величина — скаляр или псевдоскаляр, преобразование которого при инверсии сводится просто к умножению на $+1$ или -1 .

Для частицы со спином $\frac{1}{2}$ волновая функция сводится в системе покоя к одному трехмерному спинору (см. конец § 82). Понятие о внутренней четности частицы связано с поведением при инверсии этого спинора. Но в § 81 уже было указано, что хотя два возможных закона преобразования трехмерных спиноров (два знака в (81,2)) и не эквивалентны друг другу, но приписывание спинору определенной четности не имеет абсолютного смысла. Не имеет поэтому смысла говорить и о внутренней четности частицы со спином $\frac{1}{2}$ самой по себе. Можно, однако, говорить об относительной внутренней четности двух таких частиц.

Рассмотрим с этой точки зрения вопрос об относительной внутренней четности частицы и античастицы. Для частиц со спином 0 этот вопрос тривиален: такие частицы и античастицы описываются одними и теми же (скалярными или псевдоскалярными) волновыми функциями и потому их внутренне четности очевидным образом одинаковы.

Два спинора $\xi = \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix}$ и $\eta = \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix}$, образующие биспинор $\Psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$, описывающий частицу со спином $\frac{1}{2}$ (будем говорить — электрон), в системе покоя частицы сводятся к одному и тому же трехмерному спинору, который обозначим через $\Phi^{(a)} = \begin{pmatrix} \Phi^1 \\ \Phi^2 \end{pmatrix}$:

$$\xi = \eta = \Phi^{(a)}. \quad (89,2)$$

Операция инверсии, определенная согласно (81,3), заменяет ξ на η ; из (89,2) видно, что этому определению отвечает преобразование трехмерного спинора $\Phi^{(3)}$ согласно

$$\hat{P}\Phi^{(3)} = \Phi^{(3)}. \quad (89,3)$$

Позитрону же отвечают «отрицательно-частотные» волновые функции, возникающие из уравнения Дирака с изменением знака 4-импульса p^4 (напомним, что в Ψ -операторы (85,3) позитронные операторы $\hat{b}_p, \hat{b}_p^+$ входят в качестве коэффициентов при волновых функциях с амплитудами $u(-p)$). Равенство (89,2) для электрона в системе покоя следовало из уравнений Дирака (82,4) при $\mathbf{p}=0, \varepsilon=m$. Если же заменить в этих уравнениях $(\varepsilon, \mathbf{p})$ на $(-\varepsilon, -\mathbf{p})$ и затем положить $\mathbf{p}=0, \varepsilon=m$, то получим

$$\xi = -\eta \equiv \Phi^{(n)}. \quad (89,4)$$

Операция инверсии, заменяющая ξ на η , будет означать теперь для трехмерного спинора $\Phi^{(n)}$ преобразование

$$\hat{P}\Phi^{(n)} = -\Phi^{(n)} \quad (89,5)$$

со знаком, противоположным знаку в (89,3). Поэтому скаляр, построенный из произведений компонент $\Phi^{(3)}$ и $\Phi^{(n)}$, будет менять знак при инверсии. Мы приходим, таким образом, к результату, что внутренние четности частицы и античастицы со спином $\frac{1}{2}$ противоположны (В. Б. Берестецкий, 1948).

§ 90. CPT-теорема

Свойства пространственно-временной симметрии физических явлений выражаются инвариантностью описывающих их уравнений по отношению к тем или иным преобразованиям четырехмерной системы координат.

Универсальным законом природы является релятивистская инвариантность — инвариантность по отношению к преобразованиям группы Лоренца ¹⁾. Как было объяснено в § 80, в их число входят как обычные трехмерные вращения, так и преобразования Лоренца — повороты четырех-

¹⁾ Подчеркнем, во избежание недоразумений, что речь идет о явлениях, не связанных с гравитационными полями.

мерной системы координат, меняющие направление оси времени.

Наряду с этими преобразованиями существуют также и другие, не сводимые ни к каким поворотам: пространственная инверсия — изменение на обратное направление трех пространственных осей, и обращение времени — изменение на обратное направления оси времени. Инвариантность по отношению к пространственной инверсии (P -инвариантность) выражает собой зеркальную симметрию пространства. Инвариантность же по отношению к обращению времени (T -инвариантность) выражает собой эквивалентность обоих направлений времени. В рамках явлений, описываемых нерелятивистской теорией, оба эти закона соблюдаются.

В области же явлений, относящихся к релятивистской области, симметрия по отношению к пространственной инверсии (и связанный с ней закон сохранения пространственной четности) теряет свою универсальность. Существующие опытные данные показывают, что эта симметрия соблюдается в электромагнитных взаимодействиях и в так называемых *слабых взаимодействиях* (ядерные силы). Они нарушаются, однако, в так называемых *слабых взаимодействиях* (взаимодействия, приводящие к большинству сравнительно медленно происходящих распадов элементарных частиц, таких, например, как β -распад)¹⁾.

В слабых взаимодействиях не соблюдается также и симметрия между частицами и античастицами, выражаемая преобразованием зарядового сопряжения (C -инвариантность). Неизвестно, однако, никаких опытных данных, которые свидетельствовали бы о нарушении этой симметрии в электромагнитных и сильных взаимодействиях.

Нарушение симметрии по отношению к пространственной инверсии в тех или иных процессах взаимодействия само по себе может еще не означать зеркальной симметрии пространства. Симметрия пространства могла бы быть «спасена», если бы универсальным законом природы оказалась инвариантность по отношению к преобразованию, состоящему в одновременной инверсии и зарядовом сопряжении (CP -преобразование или *комбинированная инвер-*

¹⁾ Идея о возможном несохранении четности в слабых взаимодействиях была впервые высказана Цзян-дау Ли и Чжень-нин Янгом в 1956 г.

сия)¹⁾. При этом преобразовании, одновременно с пространственной инверсией, происходит замена частиц античастицами. При соблюдении *CP*-инвариантности процессы, происходящие с частицами и античастицами, отличались бы друг от друга инверсией в пространстве. В такой концепции пространство остается полностью симметричным, асимметрия же переносится на заряженные частицы. Эта асимметрия в такой же мере не затрагивала бы симметрии пространства, как ее не затрагивает существование стереоизомерных молекул (молекул, находящихся друг с другом в таком взаимоотношении, как предмет и его зеркальное изображение).

Опыт, однако, не подтверждает этих представлений полностью. Хотя большинство процессов слабых взаимодействий действительно *CP*-инвариантно, но существуют также и явления, нарушающие эту инвариантность. Какое место займут эти нарушения в будущей теории, — в настоящее время ясно.

Таким образом, требования симметрии по отношению к каждому из преобразований *C*, *P* (а также и *T*) в отдельности не являются универсальным законом природы. Подчеркнем, что их универсальность не только не подтверждается опытом, но и не является логически необходимым следствием основных принципов существующей теории. Следствием этих принципов является, однако, инвариантность по отношению к совместному применению этих трех преобразований. Покажем, каким образом эта симметрия возникает как естественное следствие требований релятивистской инвариантности.

Для лучшего уяснения последующих рассуждений напомним предварительно некоторые понятия, относящиеся к преобразованиям трехмерного пространства.

Обращение направления одной из осей координат x , y , z есть зеркальное отражение в некоторой плоскости; так, преобразование $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow y$, $z \rightarrow z$ есть отражение в плоскости yz . Это преобразование не сводимо ни к каким поворотам системы координат. Напротив, обращение направлений двух осей эквивалентно определенному повороту; так, преобразование $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow z$ есть поворот на 180° вокруг оси z . Наконец, обращение всех трех осей

¹⁾ Эти представления были выдвинуты Л. Д. Ландау (1957).

(инверсия системы координат) есть преобразование, не сводимое к поворотам; инверсия и отражение в плоскости сводимы, однако, друг к другу в том смысле, что одно из них отличается от другого лишь некоторым поворотом осей ¹⁾.

Аналогичная ситуация имеет место для четырехмерной пространственно-временной системы координат. Но в дополнение к изменению направлений одной, двух или трех осей здесь возможно еще одновременное обращение всех четырех осей (*четырёхмерная инверсия*). В чисто математическом отношении это преобразование является поворотом 4-системы координат. Правда, между 4-инверсией и теми поворотами, которые образуют группу Лоренца, имеется специфическое отличие, связанное с псевдоевклидовостью четырехмерной пространственно-временной геометрии. В силу этого свойства, никакое физическое преобразование системы отсчета (преобразование Лоренца) не может вывести ось времени за пределы внутренних полостей светового конуса (понятие светового конуса было введено в I § 34); физически этим выражается невозможность относительного движения двух систем отсчета со скоростью, превышающей скорость света. Между тем, при 4-инверсии ось времени (точнее — каждая из ее двух полуосей) переводится из одной полости светового конуса в другую.

Хотя это обстоятельство и означает физическую неосуществимость 4-инверсии как преобразования физической системы отсчета, но естественно полагать, что это отличие от других четырехмерных поворотов (преобразований Лоренца) несущественно, когда речь идет о математической инвариантности тех или иных уравнений. Таким образом, мы приходим к выводу, что всякий релятивистски инвариантный закон природы должен быть инвариантным также и по отношению к 4-инверсии. Остается выяснить, что означает это утверждение с точки зрения квантовой теории полей частиц. Сделаем это на простейшем примере поля частиц со спином 0.

¹⁾ Математически, различие между двумя типами линейных преобразований координат $x_i = \sum_k \alpha_{ik} x_k$ (где $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$) проявляется в значении определителя, составленного из их коэффициентов. Для всякого поворота системы координат определитель $|\alpha_{ik}| = 1$. Для несводимых же к поворотам отражений $|\alpha_{ik}| = -1$.

В этом случае в Ψ -операторах (85,3) волновые амплитуды $u(p)$ — скаляры и как таковые не зависят от знака их аргумента — 4-импульса p^μ . Вынеся их за скобку, можно поэтому написать просто

$$\Psi(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{V_\Omega} \sum_p u \{ \hat{a}_p e^{-i(et - \mathbf{p}\mathbf{r})} + \hat{b}_p^+ e^{i(et - \mathbf{p}\mathbf{r})} \}. \quad (90,1)$$

При 4-инверсии t и $\mathbf{r}$ заменяются на $-t$ и $-\mathbf{r}$, так что это выражение переходит в

$$\Psi(-t, -\mathbf{r}) = \frac{1}{V_\Omega} \sum_p u \{ \hat{a}_p e^{i(et - \mathbf{p}\mathbf{r})} + \hat{b}_p^+ e^{-i(et - \mathbf{p}\mathbf{r})} \}. \quad (90,2)$$

В аппарате вторичного квантования переход от (90,1) к (90,2) должен, однако, быть выражен в терминах определенного преобразования операторов рождения и уничтожения частиц. Как видно из сравнения (90,1) и (90,2), это преобразование состоит во взаимной перестановке операторов $\hat{a}_p$ и $\hat{b}_p^+$, или, что то же, в замене

$$\hat{a}_p \rightarrow \hat{b}_p^+, \quad \hat{b}_p \rightarrow \hat{a}_p^+. \quad (90,3)$$

Смысл преобразования (90,3) ясен. Инверсия меняет знак вектора импульса $\mathbf{p}$, но его знак меняется также при обращении времени (меняется на обратное направление скорости частицы). Поэтому совместное воздействие преобразований P и T оставляет импульсы частиц неизменными, в соответствии с чем преобразуются друг через друга операторы, относящиеся к состояниям с одинаковыми $\mathbf{p}$. Далее, обращение времени, заменяя будущее прошедшим, превращает возникновение частицы в ее исчезновение, — в соответствии с этим взаимно заменяются операторы рождения и уничтожения частиц. Но мы видим еще, что в (90,3) взаимно заменяются a -операторы и b -операторы; это значит, что преобразование (90,3) включает в себя также и взаимную замену частиц античастицами.

Таким образом, в релятивистской теории естественным образом возникает требование инвариантности по отношению к преобразованию, в котором одновременно с пространственной инверсией и обращением времени производится

также и зарядовое сопряжение; это утверждение называют *СРТ-теоремой*¹⁾.

Отметим, что в силу этой теоремы нарушение *СР*-инвариантности в каких-либо явлениях автоматически означает также и нарушение *Т*-инвариантности.

§ 91. Нейтрино

Уравнение Дирака инвариантно по отношению к инверсии. Эта инвариантность обеспечивается тем, что биспинорная волновая функция включает в себя оба спинора, переходящие друг в друга при инверсии. В свою очередь, необходимость включения в описание частицы двух спиноров связана с массой частицы: как видно из (82,2) или (82,6), именно через величину m осуществляется взаимное «зацепление» этих спиноров в волновом уравнении.

Эта необходимость отпадает, если масса частицы равна нулю. Такой частицей со спином $\frac{1}{2}$ является *нейтрино*. Волновое уравнение, описывающее такую частицу, может быть составлено с помощью всего одного 4-спинора, скажем, непунктирного спинора

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix}.$$

Оно имеет вид

$$(\hat{p}_0 - \hat{p}\sigma) \xi = 0 \quad (91,1)$$

(первое из уравнений (82,6) с $m=0$).

Для плоской волны (частица с импульсом p и энергией e) уравнение (91,1) сводится к алгебраической системе

$$(e - p\sigma) \xi = 0.$$

Но у частицы с равной нулю массой энергия связана с импульсом равенством $e = |p|$. Введя единичный вектор n в направлении движения, получим

$$(n\sigma) \xi = \xi. \quad (91,2)$$

Это равенство имеет простой смысл. Вспомним, что для

¹⁾ Она была сформулирована Г. Людерсом, В. Паули и Ю. Швингером (1955).

двухкомпонентной волновой функции матрица $\hat{s} = \frac{1}{2}\sigma$ является оператором спина частицы (§ 40). Произведение же $\frac{1}{2}\boldsymbol{n}\sigma$ является, следовательно, оператором спиральности частицы $\hat{\lambda}$ — проекции спина на направление импульса. Поэтому равенство (91,2) означает, что частица имеет определенную спиральность $\lambda = +\frac{1}{2}$ — спин направлен по направлению движения.

Таким образом, мы приходим к заключению, что частица, описываемая всего одним (непунктирным) спинором, должна всегда иметь определенную спиральность $\lambda = +\frac{1}{2}$. Совершенно аналогичным образом, для частицы, описываемой пунктирным спинором

$$\eta = \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix},$$

получается вместо (91,2) уравнение

$$(\boldsymbol{n}\sigma) \eta = -\eta, \quad (91,3)$$

т. е. такая частица всегда имеет спиральность $\lambda = -\frac{1}{2}$ — ее спин направлен противоположно импульсу. Можно сказать, что в обоих случаях обязательна продольная поляризация частицы.

Легко видеть, что частица и античастица должны иметь противоположные спиральности. Действительно, если одна из них описывается спинорами ξ , то другая должна описываться комплексно сопряженными спинорами ξ^* , — это очевидно из вида Ψ -операторов (85,3), в которые операторы уничтожения частиц и античастиц, $\hat{a}_p$ и $\hat{b}_p$, входят умноженными на комплексно сопряженные функции. Но спинор ξ^* , сопряженный непунктирному спинору ξ , эквивалентен пунктирному спинору, чем и доказывается сделанное утверждение. Принято называть нейтрино частицу со спиральностью $-\frac{1}{2}$, а антинейтрино — частицу со спиральностью $\frac{1}{2}$ ¹⁾.

Инверсия меняет знак спиральности. Действительно, проекция спина на направление движения получается

¹⁾ Существование нейтрино (электрически нейтральной безмассовой частицы со спином $\frac{1}{2}$) было предсказано теоретически Паули (1931) для объяснения свойств β -распада. Теория нейтрино как частицы, описываемой двухкомпонентным 4-спинором, была сформулирована Ландау, А. Саламом и Ли и Янгом в 1957 г.

скалярным перемножением векторов момента и импульса частицы; первый из них (будучи аксиальным вектором) не меняется при инверсии, а второй (полярный вектор) меняет знак. Отсюда ясно видна несимметричность нейтрино по отношению к инверсии: инверсия «превращает» нейтрино в несуществующую в природе частицу — нейтрино с другим знаком спиральности. Симметрия сохраняется только по отношению к комбинированной инверсии — инверсии с одновременной заменой нейтрино на антинейтрино. Естественно поэтому также и нарушение зеркальной симметрии в процессах, идущих с участием нейтрино (таких, например, как β -распад нейтрона на протон, электрон и антинейтрино: $n \rightarrow p + e + \bar{\nu}$).

Глава XIV

ЭЛЕКТРОН ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

§ 92. Уравнение Дирака для электрона во внешнем поле

Волновые уравнения свободных частиц по существу выражают собой лишь те свойства, которые связаны с общими требованиями пространственно-временной симметрии. Происходящие же с частицами физические процессы зависят от свойств их взаимодействий.

В релятивистской теории оказывается невозможным основанное на каком-либо простом обобщении волновых уравнений описание частиц, способных к сильным взаимодействиям, описание, выходящее за рамки сведений, содержащихся в уравнениях свободных частиц.

Метод волновых уравнений, однако, применим для описания электромагнитных взаимодействий частиц, не способных к сильным взаимодействиям. Сюда относятся электроны (и позитроны), и, таким образом, для существующей теории оказывается доступной вся огромная область квантовой электродинамики электронов ¹⁾.

В этой главе мы рассмотрим некоторые вопросы квантовой электродинамики, ограниченные рамками теории одной частицы. Это — задачи, в которых число частиц не меняется, а взаимодействие может быть описано в терминах внешнего электромагнитного поля, создаваемого источниками, состояние которых остается в течение процесса неизменным.

¹⁾ Не способны к сильным взаимодействиям также и нестабильные частицы — μ -мезоны; они обладают тем же спином ($\frac{1}{2}$), что и электрон, и описываются той же квантовой электродинамикой в области явлений, происходящих за времена, малые по сравнению с их продолжительностью жизни (связанной со слабыми взаимодействиями).

Волновое уравнение для электрона в заданном внешнем поле можно получить подобно тому, как это делается в нерелятивистской теории (§ 43). Пусть Φ — скалярный, а $\mathbf{A}$ — векторный потенциалы поля. Мы получим искомое уравнение, заменив в гамильтониане уравнения Дирака (83,9) оператор импульса $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ на разность $\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}$ и, кроме того, добавив к гамильтониану потенциальную энергию частицы $e\Phi$ ¹⁾:

$$\hat{H} = \alpha (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) + \beta m + e\Phi. \quad (92,1)$$

Этим исчерпываются все необходимые изменения; никаких искусственно вводимых дополнительных членов (подобных введенному в (43,4)) здесь не требуется: мы увидим ниже, что магнитный момент электрона появляется здесь автоматически.

В четырехмерной записи переход от (83,9) к (92,1) означает замену оператора 4-импульса $\hat{p}_\mu = i\partial/\partial x^\mu$ согласно

$$\hat{p}_\mu \rightarrow \hat{p}_\mu - eA_\mu, \quad (92,2)$$

где $A^\mu = (\Phi, \mathbf{A})$, $A_\mu = (\Phi, -\mathbf{A})$ — 4-потенциал поля. Поэтому уравнение Дирака для частицы в поле можно записать также и в виде

$$[\gamma^\mu (\hat{p}_\mu - eA_\mu) - m] \Psi = 0, \quad (92,3)$$

получаемом путем этой замены из (83,3).

Плотность тока, выраженная через волновую функцию, дается той же формулой (84,7), что и в отсутствие внешнего поля. Легко видеть, что при повторении с уравнением (92,3) тех же выкладок, которые были произведены при выводе (84,7), 4-потенциал A_μ выпадает и уравнение непрерывности получается для прежнего выражения тока.

§ 93. Магнитный момент электрона²⁾

В § 43 был установлен вид нерелятивистского гамильтониана для движения частицы со спином во внешнем магнитном поле. В это выражение, однако, входил магнитный

¹⁾ Буквой e обозначается заряд вместе со своим знаком, так что для электрона $e = -|e|$, а для позитрона $e = +|e|$.

²⁾ В этом и следующем параграфах пользуемся обычными единицами.

момент частицы как эмпирический параметр, величина которого не могла быть вычислена теоретически. Для частицы, поведение которой в электромагнитном поле подчиняется уравнению Дирака (92,3) (будем говорить — для электрона), значение магнитного момента автоматически устанавливается самим этим уравнением.

Имея в виду эту цель, покажем, каким образом можно привести уравнение Дирака к приближенному виду, соответствующему нерелятивистскому гамильтониану (43,4). Поскольку речь идет о движении частицы со скоростями $v \ll c$, то естественно исходить из стандартного представления биспинорной функции Ψ , в котором одна пара компонент мала по сравнению с другой: $\chi \ll \varphi$ (см. конец § 83).

В § 83 уравнения Дирака в стандартном представлении волновой функции были написаны для свободной частицы — (83,11). Введение в эти уравнения внешнего электромагнитного поля достигается заменой операторов согласно (92,2); таким образом, получим

$$\begin{aligned} (\hat{p}_0 - e\Phi) \varphi - \sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi &= mc\varphi, \\ -(\hat{p}_0 - e\Phi) \chi + \sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi &= mc\chi, \end{aligned} \quad (93,1)$$

где

$$\hat{p}_0 = \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla.$$

Для перехода к нерелятивистскому приближению необходимо, однако, произвести еще предварительно определенное преобразование волновой функции. Дело в том, что релятивистское выражение для энергии частицы (а с ним и релятивистский гамильтониан) содержит в себе лишний (по сравнению с нерелятивистским выражением) член — энергию покоя mc^2 . Это приводит к появлению во временной зависимости волновой функции лишнего множителя $\exp(-imc^2t/\hbar)$. Для исключения этого множителя вводим вместо Ψ новую волновую функцию Ψ' согласно

$$\Psi = \Psi' e^{-imc^2t/\hbar}. \quad (93,2)$$

Подставив (93,2) в (93,1), получим следующие уравнения для двухкомпонентных величин φ' и χ' , составляющих

четырёхкомпонентную Ψ' :

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \varphi' = c\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi', \quad (93,3)$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + 2mc^2 \right) \chi' = c\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi' \quad (93,4)$$

(ниже мы будем опускать штрихи у φ' и χ' ; это не вызовет недоразумений, так как в этом параграфе мы пользуемся только преобразованной функцией Ψ').

В первом приближении оставляем в скобках в левой стороне уравнения (93,4) лишь самый большой член $2mc^2$. Тогда это уравнение позволяет сразу выразить χ через φ согласно

$$\chi = \frac{1}{2mc} \sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi. \quad (93,5)$$

Множитель $1/c$ в правой стороне равенства как раз и выражает малость χ по сравнению с φ . Подставив теперь (93,5) в (93,3), получим уравнение, содержащее уже только φ :

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \varphi = \frac{1}{2m} \left(\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 \varphi.$$

Раскроем выражение в правой стороне этого уравнения. При этом воспользуемся следующими свойствами матриц Паули, непосредственно следующими из их определения (82,5):

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \\ \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y, \\ \sigma_x \sigma_y &= -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z. \end{aligned} \quad (93,6)$$

Обозначив временно $\hat{\mathbf{f}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$, пишем

$$\begin{aligned} (\sigma \hat{\mathbf{f}})^2 &= (\sigma_x \hat{f}_x + \sigma_y \hat{f}_y + \sigma_z \hat{f}_z) (\sigma_x \hat{f}_x + \sigma_y \hat{f}_y + \sigma_z \hat{f}_z) = \\ &= \hat{f}_x^2 + \hat{f}_y^2 + \hat{f}_z^2 + i\sigma_z (\hat{f}_x \hat{f}_y - \hat{f}_y \hat{f}_x) + \dots \end{aligned}$$

Если бы $\hat{f}_x$, $\hat{f}_y$, $\hat{f}_z$ были коммутативны, мы получили бы

просто $\hat{f}^2$. Но в данном случае

$$\begin{aligned}\hat{f}_x \hat{f}_y - \hat{f}_y \hat{f}_x &= \\ &= \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) - \\ &- \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) = \\ &= \frac{ie\hbar}{c} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \frac{ie\hbar}{c} H_z \quad \text{и т. д.,}\end{aligned}$$

где $\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}$ — магнитное поле. Таким образом,

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

и в результате мы приходим к следующему уравнению для двухкомпонентной волновой функции φ :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H} + e\Phi \right] \varphi \equiv \hat{H} \varphi. \quad (93,7)$$

Это — так называемое *уравнение Паули*. Сравнение фигурирующего в нем гамильтониана с (43,4) показывает, что электрон обладает магнитным моментом, которому соответствует оператор

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} = \frac{e\hbar}{mc} \hat{\mathbf{s}}, \quad (93,8)$$

где $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}$ — оператор спина электрона. Величина этого момента, определенная согласно (43,1), равна

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc}. \quad (93,9)$$

Как уже упоминалось в § 43, гиромангнитное отношение для собственного магнитного момента электрона (e/mc) оказывается вдвое большим, чем это было бы для магнитного момента, связанного с орбитальным движением¹⁾.

Формула (93,9) справедлива также и для магнитного момента μ -мезона (с его массой в качестве m в знаменателе формулы). Она, однако, совершенно непригодна для протонов и нейтронов, хотя эти частицы тоже имеют спин $\frac{1}{2}$;

¹⁾ Этот результат был получен Дираком в 1928 г. Двухкомпонентная волновая функция, удовлетворяющая уравнению (93,7), была введена Паули (1927) еще до открытия Дираком его уравнения.

в особенности разительно расхождение в случае нейтрона: будучи электрически нейтральным, согласно (93,9) он не должен был бы вообще обладать магнитным моментом. Здесь с очевидностью проявляется неприменимость существующей квантовой электродинамики к частицам, способным к сильным взаимодействиям.

§ 94. Спин-орбитальное взаимодействие

Произведенные в предыдущем параграфе вычисления по существу представляют собой начало разложения точного решения уравнения Дирака по степеням малого отношения v/c . Уравнение (93,7) отвечает учету в таком разложении лишь членов первого порядка малости (на что указывает множитель $1/c$ в появившемся в гамильтониане дополнительном члене $-\hat{\mu}\mathbf{H}$).

В следующем, втором, приближении в гамильтониане добавляются еще новые члены. Соответствующие вычисления становятся, однако, более громоздкими, и мы не будем проводить их здесь. Приведем лишь окончательный результат для гамильтониана электрона во внешнем электрическом поле с точностью до членов порядка $1/c^2$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\Phi - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} [\mathbf{E}\hat{p}] - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \operatorname{div} \mathbf{E}, \quad (94,1)$$

где Φ — потенциал, а $\mathbf{E} = -\operatorname{grad}\Phi$ — напряженность поля. Как и в (93,7), этот гамильтониан действует на двухкомпонентную волновую функцию.

Последние три члена в (94,1) — интересующие нас поправки порядка $1/c^2$. Первый из них соответствует релятивистской поправке к классическому выражению кинетической энергии частицы:

$$\sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + m^2c^4} - mc^2 \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \dots$$

Следующий поправочный член в (94,1) может быть назван энергией *спин-орбитального взаимодействия*, — энергия взаимодействия движущегося магнитного момента с электрическим полем. Если электрическое поле центрально-симметрично, то

$$\mathbf{E} = -\frac{r}{r} \frac{d\Phi}{dr},$$

и оператор спин-орбитального взаимодействия принимает вид

$$\hat{V}_{sl} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2r} \boldsymbol{\sigma} [\mathbf{r}\mathbf{p}] \frac{d\Phi}{dr} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2r} \frac{dU}{dr} \hat{\mathbf{l}} \hat{\mathbf{s}}. \quad (94,2)$$

Здесь $\hbar\mathbf{l} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$ — оператор орбитального момента электрона, $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ — оператор его спина, а $U = e\varphi$ — потенциальная энергия электрона в поле. Взаимодействие такого вида рассматривалось уже в § 51 как один из источников тонкой структуры атомных уровней энергии ¹⁾.

Последний поправочный член в (94,1) отличен от нуля только в тех точках, где находятся заряды, создающие поле; только в этих точках отлична от нуля $\text{div}\mathbf{E}$.

Гамильтонианом (94,1) можно воспользоваться для вычисления релятивистских поправок к уровням энергии атома водорода, т. е. электрона в кулоновом поле неподвижного ядра — протона (с зарядом $+|e|$).

Потенциал поля заряда $+|e|$ есть $\Phi = |e|/r$, а дивергенция его напряженности: $\text{div}\mathbf{E} = -\Delta\Phi = 4\pi|e|\delta(\mathbf{r})$ (см. I (59,10)). Поэтому поправочные члены в гамильтониане атома водорода, совокупность которых обозначим через $\hat{V}^{(2)}$, принимают вид

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{8m^3c^2} \Delta^2 + \frac{\hbar^2c^2}{2m^2c^2r^3} \hat{\mathbf{l}} \hat{\mathbf{s}} + \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2c^2} \delta(\mathbf{r}). \quad (94,3)$$

Напомним, что нерелятивистское выражение для уровней энергии атома водорода (§ 31)

$$E_{\text{нер}} = -\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}. \quad (94,4)$$

Оно зависит только от главного квантового числа n и не зависит от орбитального момента электрона l , пробегающего (при заданном n) значения $l=0, 1, \dots, n-1$. Нерелятивистские уровни (94,4) не зависят также и от направления спина электрона по отношению к его орбитальному моменту, т. е. не зависят от полного момента j , который может принимать (при заданном $l \neq 0$) два значения: $j = l \pm \frac{1}{2}$.

Искомые поправки ΔE к уровням (94,4) могут быть найдены по общим правилам теории возмущений (§ 32): рассматривая (94,3) как оператор малого возмущения, надо

¹⁾ Другой тип релятивистских взаимодействий — спин-спиновое — возникает, конечно, лишь в системе нескольких частиц и отсутствует для одного электрона во внешнем поле.

вычислить его среднее значение (диагональный матричный элемент) по отношению к невозмущенным волновым функциям, т. е. обычным нерелятивистским волновым функциям атома водорода. Вычисление приводит к следующему результату:

$$\Delta E = - \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \frac{m e^4 \alpha^2}{2 \hbar^2 n^3}, \quad (94,5)$$

где

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,04} \quad (94,6)$$

(величину α называют *постоянной тонкой структуры*)¹⁾. Малость поправки (94,5) по сравнению с (94,4) выражается множителем α^2 .

Сдвиг уровня (94,5) зависит уже не только от n , но и от j . Эта зависимость как раз и означает расщепление уровней (94,4) на компоненты тонкой структуры; происходит, как говорят, снятие вырождения, имевшегося в нерелятивистском приближении. Это снятие, однако, оказывается не полным: остаются двукратно взаимно вырожденными уровни с одинаковыми значениями n и j , но различными значениями $l = j \pm 1/2$ (здесь снова проявляется специфика атома водорода с его чисто кулоновым полем ядра, по сравнению с более сложными атомами). Таким образом, последовательность водородных уровней с учетом тонкой структуры такова:

$$\begin{array}{c} 1s_{1/2} \\ \underbrace{2s_{1/2}, 2p_{1/2}}_{}, 2p_{3/2} \\ \underbrace{3s_{1/2}, 3p_{1/2}}_{}, \underbrace{3p_{3/2}, 3d_{3/2}}_{}, 3d_{5/2} \\ \dots \end{array}$$

где фигурными скобками объединены взаимно вырожденные состояния. Невырожденными оказываются лишь уровни с наибольшим возможным (при заданном n) значением j .

Забегая вперед, укажем, что оставшееся здесь вырождение снимается так называемыми радиационными поправками (*смещение Лэмба*), не учитываемыми уравнениями Дирака одноэлектронной задачи; об этих поправках будет идти речь в § 106.

¹⁾ Эта формула была впервые получена Арнольдом Зоммерфельдом, исходя из старой теории Бора, еще до создания квантовой механики.

Глава XV

ИЗЛУЧЕНИЕ

§ 95. Оператор электромагнитного взаимодействия

От задач, в которых электромагнитное поле выступает в пассивной роли внешних условий для движения частиц, перейдем к более широкой категории электродинамических явлений, сопровождающихся изменением состояния самого поля. Речь идет о явлениях испускания, поглощения или рассеяния фотонов системами заряженных частиц.

Взаимодействие электронов с полем электромагнитного излучения, как правило, может рассматриваться с помощью теории возмущений. Это обстоятельство связано со сравнительной слабостью электромагнитных взаимодействий. Взаимодействие электрона с полем определяется его зарядом e . При этом роль «константы связи», задающей масштаб взаимодействия, играет составленная из e , c и $\hbar$ безразмерная величина $\alpha = e^2/\hbar c$ — введенная уже в § 94 постоянная тонкой структуры. Слабость электромагнитных взаимодействий выражается в малости этой постоянной: $\alpha = 1/137$. Эта малость играет фундаментальную роль в квантовой электродинамике.

Выясним, прежде всего, вид оператора взаимодействия электрона с полем излучения, играющего роль оператора возмущения. Условимся считать (как и в гл. XI), что потенциалы поля выбраны в калибровке, в которой скалярный потенциал $\Phi = 0$, так что поле описывается одним только векторным потенциалом $\mathbf{A}$. Согласно (92,1), взаимодействие электрона с заданным электромагнитным полем описывается членом $\hat{V} = -e\mathbf{c}\mathbf{A}$ в его гамильтониане. Для перехода к более общему случаю процессов с изменением состояния поля, потенциал $\mathbf{A}$ должен быть заменен соответствующим вторич-

но квантованным оператором $\hat{\mathbf{A}}$; тогда оператор взаимодействия будет ¹⁾

$$\hat{V} = -e\alpha\hat{\mathbf{A}}. \quad (95,1)$$

Оператор $\hat{\mathbf{A}}$ представляет собой сумму

$$\hat{\mathbf{A}}(t, \mathbf{r}) = \sum_n \{ \hat{c}_n \mathbf{A}_n(t, \mathbf{r}) + \hat{c}_n^+ \mathbf{A}_n^*(t, \mathbf{r}) \}, \quad (95,2)$$

содержащую операторы уничтожения и рождения фотонов в различных состояниях (нумеруемых индексом n); коэффициенты $\mathbf{A}_n(t, \mathbf{r})$ играют роль волновых функций этих состояний. Состояние поля задается совокупностью чисел заполнения N_n всех фотонных состояний. При этом сами фотонные состояния могут задаваться различными способами, в зависимости от постановки той или иной конкретной задачи. Если, например, нас интересует излучение или поглощение фотонов с определенными волновыми векторами $\mathbf{k}$ и поляризациями $\mathbf{e}$, то волновые функции $\mathbf{A}_n(t, \mathbf{r})$ — плоские волны (76,16). Если же ставится вопрос об излучении фотонов с определенными значениями момента j , то $\mathbf{A}_n$ — сферические волны, о которых шла речь в § 78.

В первом приближении теории возмущений вероятность того или иного процесса определяется квадратом $|V_{fi}|^2$, где V_{fi} — матричный элемент оператора возмущения для перехода между начальным (индекс i) и конечным (индекс f) состояниями системы зарядов и поля. Каждый из операторов $\hat{c}_n, \hat{c}_n^+$ имеет отличные от нуля матричные элементы лишь для увеличения или уменьшения соответствующего числа заполнения N_n на 1 (при неизменных остальных числах заполнения). Поэтому и оператор $\hat{\mathbf{A}}$ имеет матричные элементы лишь для переходов с изменением числа фотонов на 1. Другими словами, в первом приближении теории возмущений возникают только процессы однократного излучения или поглощения фотона.

¹⁾ Операция зарядового сопряжения — замена частиц античастицами — не должна менять вида оператора взаимодействия. Заменяя положительно заряженные частицы отрицательно заряженными, это преобразование означает, в частности, замену $e \rightarrow -e$. Инвариантность $\hat{V}$ требует одновременной замены оператора поля фотонов $\hat{\mathbf{A}} \rightarrow -\hat{\mathbf{A}}$. Это значит, что фотоны — зарядово нечетные частицы.

Согласно (76,12) матричные элементы

$$\langle N_n - 1 | c_n | N_n \rangle = \sqrt{N_n}, \quad (95,3)$$

$$\langle N_n + 1 | c_n^+ | N_n \rangle = \sqrt{N_n + 1}. \quad (95,4)$$

Первый из них отвечает поглощению одного фотона (сорта n) — число заполнения уменьшается на 1; второй же отвечает испусканию одного фотона — число заполнения возрастает на 1. Если в начальном состоянии поля фотоны (сорта n) отсутствуют, то $\langle 1 | c_n^+ | 0 \rangle = 1$; матричный же элемент оператора $\hat{A}$ содержит, кроме того, еще и множитель A_n^* , стоящий в сумме (95,2) в качестве коэффициента при $\hat{c}_n^+$. Таким образом, полный матричный элемент оператора (95,1) для испускания фотона есть

$$V_{fi}(t) = -e \int (\Psi_f^* \alpha \Psi_i) A_n^* dV, \quad (95,5)$$

где Ψ_i и Ψ_f — волновые функции начального и конечного состояний излучателя (электрона)¹⁾. Аналогичным образом получается матричный элемент для поглощения фотона:

$$V_{fi}(t) = -e \int (\Psi_f^* \alpha \Psi_i) A_n dV. \quad (95,6)$$

Он отличается от (95,5) лишь тем, что вместо A_n^* в нем стоит A_n .

Указанием аргумента t у V_{fi} мы подчеркиваем, что речь идет о зависящем от времени матричном элементе. Выделив в волновых функциях временные множители, можно обычным образом (в соответствии с правилом (11,4)) перейти к не зависящим от времени матричным элементам:

$$V_{fi}(t) = V_{fi} e^{-i(E_i - E_f \mp \omega)t}, \quad (95,7)$$

где E_i , E_f — начальная и конечная энергии излучающей системы, а верхний и нижний знаки в показателе — для испускания и поглощения фотона с энергией ω .

¹⁾ Во избежание недоразумений подчеркнем, что один электрон может излучать лишь при движении во внешнем поле. Невозможность испускания фотона свободным (движущимся с постоянной скоростью) электроном в особенности очевидна, если рассмотреть его в системе отсчета, в которой он покоится: в этой системе энергия электрона равна m и не может уменьшиться, как это должно было бы быть при испускании фотона.

Фигурирующее в подынтегральном выражении в (95,5) или (95,6) произведение

$$j_{fi} = \Psi_f^* \alpha \Psi_i \quad (95,8)$$

построено аналогично выражению $j = \Psi^* \alpha \Psi$ (84,9) для тока в уравнении Дирака; вместо двух одинаковых волновых функций в нем стоят различные (начальная и конечная) волновые функции. Величину (95,8) называют *током перехода*.

Если речь идет об испускании (или поглощении) фотона с определенным направлением волнового вектора $\mathbf{k}$ и определенной поляризацией $\mathbf{e}$, то в качестве $\mathbf{A}_n(\mathbf{r})$ надо брать функции

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{r}) = \mathbf{e} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (95,9)$$

(плоская волна (76,16) без множителя $e^{-i\omega t}$). Для матричного элемента перехода с излучением такого фотона будем иметь

$$V_{fi} = -e \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} e^{i\mathbf{j}_{fi}(\mathbf{k})}, \quad (95,10)$$

где

$$\mathbf{j}_{fi}(\mathbf{k}) = \int \mathbf{j}_{fi}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV. \quad (95,11)$$

Интеграл (95,11) представляет собой компоненту Фурье функции $\mathbf{j}_{fi}(\mathbf{r})$, о нем говорят как о *токе перехода в импульсном представлении*.

Вероятность испускания фотона может быть найдена по матричному элементу (95,10) непосредственно с помощью общей формулы теории возмущений, полученной в § 35. Будем считать, что начальное и конечное состояния излучателя относятся к дискретному спектру его уровней энергии. Конечное состояние всей системы электрон + поле будет, однако, относиться к непрерывному спектру за счет испущенного фотона, — спектр возможных значений энергии фотона непрерывен. Таким образом, мы имеем здесь дело именно с той постановкой задачи, которая рассматривалась в § 35. Согласно (35,6), вероятность (в 1 сек) перехода $i \rightarrow f$ с испусканием фотона будет

$$d\omega = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \omega) dv, \quad (95,12)$$

где dv условно обозначает совокупность величин, характеризующих состояние фотона и пробегающих непрерывный ряд значений. Для фотонов с определенными значениями волнового вектора величинами v являются компоненты k , так что $dv = dk_x dk_y dk_z = \omega^2 d\omega d\Omega$ (где $d\Omega$ — элемент телесных углов для направлений k). При таком выборе величин v в формуле (95,12) подразумевалось бы, что волновая функция фотона нормирована на $\delta(k)$. Между тем функция (95,9) нормирована на 1 фотон в объеме Ω ; в этой нормировке волновая функция имеет множитель $1/\sqrt{\Omega}$ вместо множителя $(2\pi)^{-3/2}$ в нормировке на $\delta(k)$ (ср. (27,9) и (12,10)). Поэтому формулу (95,12) надо написать теперь в виде

$$d\omega = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \omega) \frac{\Omega \omega^2 d\omega d\Omega}{(2\pi)^3}. \quad (95,13)$$

Фигурирующая здесь δ -функция выражает закон сохранения энергии: энергия испускаемого фотона равна убыли энергии излучателя, $\omega = E_i - E_f$. Интегрирование формулы (95,13) по $d\omega$ устранивает эту δ -функцию и приводит к следующему окончательному выражению для вероятности излучения фотона с энергией $\omega = E_i - E_f$ в направлении в телесном угле $d\Omega$:

$$d\omega = \frac{\Omega}{4\pi^2} |V_{fi}|^2 \omega^2 d\Omega. \quad (95,14)$$

Сюда должен быть подставлен матричный элемент (95,10).

§ 96. Спонтанное и вынужденное испускание¹⁾

В следующих параграфах полученные выше формулы будут использованы для вычисления вероятностей переходов в ряде конкретных случаев. Здесь же мы рассмотрим некоторые общие соотношения между различными видами радиационных процессов.

Матричный элемент (95,5) относится к процессу испускания фотона при условии, что в начальном состоянии поля фотонов данного сорта нет. Если же в начальном состоянии уже имелось N_n таких фотонов, то матричный элемент перехода умножается еще на $\sqrt{N_n + 1}$ (согласно (95,4)). Вероятность же перехода соответственно умножается на $N_n + 1$.

¹⁾ В этом параграфе пользуемся обычными единицами.

Единица в этом множителе отвечает спонтанному испусканию, происходящему и при $N_n = 0$. Член же N_n обуславливает *вынужденное* (или *индуцированное*) испускание: мы видим, что наличие фотонов в начальном состоянии поля стимулирует дополнительное испускание таких же фотонов.

Если переход $i \rightarrow f$ представляет собой испускание фотона системой, переходящей с некоторого уровня E_i на более низкий уровень E_f , то обратный переход $f \rightarrow i$ будет поглощением такого же фотона системой, переходящей с уровня E_f на уровень E_i . Матричный элемент этого обратного перехода отличается от матричного элемента прямого перехода заменой множителя (95,4) на (95,3), т. е. заменой $\sqrt{N_n + 1}$ на $\sqrt{N_n}$. Отсюда следует, что между вероятностями испускания и поглощения фотона (при переходах между заданной парой уровней излучающей системы) имеет место соотношение

$$\frac{\omega_{\text{изл}}}{\omega_{\text{полг}}} = \frac{N_n + 1}{N_n} \quad (96,1)$$

(оно было впервые установлено в 1916 г. *Эйнштейном*, сказавшим, таким образом, явление вынужденного испускания).

Свяжем число фотонов с интенсивностью падающего извне на систему излучения. Пусть

$$I_{\text{ке}} d\omega do \quad (96,2)$$

есть энергия излучения, падающего в 1 сек на площадку в 1 см^2 и имеющего поляризацию ϵ , частоты — в интервале $d\omega$ и направление волнового вектора — в элементе телесного угла do . Указанным интервалам отвечают $\Omega k^2 dk do / (2\pi)^3$ осцилляторов поля (в объеме Ω), на каждый из которых приходится по $N_{\text{ке}}$ фотонов данной поляризации. Поэтому ту же энергию (96,2) мы получим, составив произведение

$$\frac{c}{\Omega} \frac{\Omega k^2 dk do}{(2\pi)^3} N_{\text{ке}} \cdot \hbar \omega = \frac{\hbar \omega^3}{8\pi^3 c^2} N_{\text{ке}} d\omega do.$$

Отсюда находим искомое соотношение

$$N_{\text{ке}} = \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar \omega^3} I_{\text{ке}}. \quad (96,3)$$

Пусть $dw_{\text{ке}}^{(\text{сп})}$ есть вероятность спонтанного испускания фотона с поляризацией ϵ в телесный угол do ; индексами (ин)

и (погл) отметим аналогичные вероятности для индуцированного испускания и для поглощения. Согласно (96,1) и (96,3) эти вероятности связаны между собой следующими соотношениями:

$$dw_{ke}^{(\text{погл})} = dw_{ke}^{(\text{ин})} = dw_{ke}^{(\text{сп})} \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar \omega^3} I_{ke}. \quad (96,4)$$

Если падающее излучение изотропно и не поляризовано (I_{ke} не зависит от направлений $\mathbf{k}$ и $\mathbf{e}$), то интегрирование (96,4) по $d\omega$ и суммирование по поляризациям дают аналогичные соотношения между полными вероятностями радиационных переходов (между заданными состояниями системы зарядов):

$$w^{(\text{погл})} = w^{(\text{ин})} = w^{(\text{сп})} \frac{\pi^2 c^2}{\hbar \omega^3} I, \quad (96,5)$$

где $I = 2 \cdot 4\pi I_{ke}$ — полная спектральная интенсивность падающего излучения.

Если состояния i и f излучающей (или поглощающей) системы вырождены¹⁾, то полная вероятность излучения (или поглощения) данных фотонов получается суммированием по всем взаимно вырожденным конечным состояниям и усреднением по всем возможным начальным состояниям. Обозначим кратности вырождения (*статистические веса*) состояний i и f посредством g_i и g_f . Для процессов спонтанного и индуцированного испускания начальными являются состояния i , а для поглощения — состояния f . Предполагая в каждом случае все g_i или g_f начальных состояний равновероятными, получим, очевидно, вместо (96,5) следующие соотношения:

$$g_f w^{(\text{погл})} = g_i w^{(\text{ин})} = g_i w^{(\text{сп})} \frac{\pi^2 c^2}{\hbar \omega^3} I. \quad (96,6)$$

§ 97. Дипольное излучение

Очень важен случай, когда длина волны фотона λ велика по сравнению с размерами излучающей системы a . Такая ситуация обычно связана с малостью скоростей частиц по сравнению со скоростью света (ср. I § 80).

¹⁾ Это может быть, например, вырождение по направлениям момента излучающего атома.

В первом приближении по малому отношению a/λ в интеграле (95,10) можно заменить единицей множитель e^{-ikr} , мало меняющийся на протяжении размеров системы, т. е. в области, где функции ψ_i и ψ_f заметно отличны от нуля. Такая замена означает, другими словами, пренебрежение импульсом фотона по сравнению с импульсами частиц в системе (в обычных единицах первый есть $\hbar k$, а вторые — порядка величины $\hbar/a$). Это приближение соответствует дипольному случаю в классической теории излучения.

В том же приближении интеграл

$$j_{fi}(0) = \int \psi_f^* \alpha \psi_i dV$$

может быть заменен его нерелятивистским выражением, т. е. просто матричным элементом скорости электрона $\mathbf{v}$ по отношению к шредингеровским (нерелятивистским) волновым функциям. В свою очередь, матричный элемент $\mathbf{v}_{fi}$ может быть выражен через такой же элемент радиус-вектора электрона: поскольку $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}$, то согласно (11,8) имеем $\mathbf{v}_{fi} = i(E_f - E_i)\mathbf{r}_{fi}$; разность $E_f - E_i$ совпадает с частотой ω испускаемого фотона, так что

$$\mathbf{j}_{fi} = \mathbf{v}_{fi} = -i\omega \mathbf{r}_{fi} = -\frac{i\omega}{e} \mathbf{d}_{fi}, \quad (97,1)$$

где $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$ — дипольный момент электрона (в его орбитальном движении). Подставив (97,1) в (95,10), находим ¹⁾

$$V_{fi} = i \sqrt{\frac{2\pi\omega}{\Omega}} \mathbf{e}^* \mathbf{d}_{fi}, \quad (97,2)$$

а затем согласно (95,14) следующую формулу для вероятности дипольного излучения:

$$d\omega = \frac{\omega^3}{2\pi} |\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{fi}|^2 d\Omega \quad (97,3)$$

(направление волнового вектора фотона $\mathbf{k}$ фигурирует здесь в неявном виде: вектор поляризации $\mathbf{e}$ должен быть перпендикулярен $\mathbf{k}$).

¹⁾ Аналогичное выражение для матричного элемента перехода с поглощением фотона:

$$V_{fi} = -i \sqrt{\frac{2\pi\omega}{\Omega}} \mathbf{e} \mathbf{d}_{fi}. \quad (97,2a)$$

Оно получается из (95,6) точно так же, как (97,2) получается из (95,5).

Полная вероятность испускания получается интегрированием (97,3) по всем направлениям фотона и суммированием по его двум возможным независимым поляризациям. Пусть $\mathbf{e}$ отвечает линейной поляризации; тогда $\mathbf{e}$ — вещественный единичный вектор и произведение $\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{fi}$ есть одна из декартовых компонент вектора $\mathbf{d}_{fi}$. Заменяв квадрат $|(d_{fi})_x|^2$ его средним значением, равным $1/3 |\mathbf{d}_{fi}|^2$, мы сведем дальнейшее интегрирование по $d\Omega$ к простому умножению на 4π , а суммирование по поляризациям — к умножению на 2. Таким образом, полная вероятность испускания фотона равна

$$\omega = \frac{4\omega^2}{3} |\mathbf{d}_{fi}|^2,$$

или в обычных единицах

$$\omega = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2. \quad (97,4)$$

Интенсивность излучения I получается умножением вероятности на $\hbar\omega$:

$$I = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2. \quad (97,5)$$

Обратим внимание на то, что приближенное выражение матричного элемента (97,2) представляет собой матричный элемент оператора

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{E}}\mathbf{d}, \quad (97,6)$$

где $\hat{\mathbf{E}} = -\partial \hat{\mathbf{A}} / \partial t$ — оператор напряженности электрического поля, а $\mathbf{d}$ — оператор дипольного момента электрона; (97,2) получается из (97,6) точно так же, как (95,5) получается из (95,1). Приближенный оператор взаимодействия (97,6) как раз соответствует классическому нерелятивистскому выражению потенциальной энергии системы зарядов в квазиоднородном электрическом поле (см. I § 64). Это обстоятельство важно в том отношении, что позволяет широко раздвинуть область применения полученных в этом параграфе формул: они относятся не только к одноэлектронному излучателю, но и к излучению любой нерелятивистской системой частиц.

Формула (97,5) обнаруживает непосредственную аналогию с классической формулой (см. I (80,12)) для интенсивности дипольного излучения системой периодически

движущихся частиц: интенсивность излучения с частотой $\omega = n\omega_0$ (где ω_0 — частота движения частиц, n — целое число) равна

$$I_n = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_n|^2, \quad (97,7)$$

где $\mathbf{d}_n$ — компоненты разложения дипольного момента системы в ряде Фурье:

$$\mathbf{d}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{d}_n e^{-in\omega_0 t}. \quad (97,8)$$

Квантовая формула (97,5) получается из (97,7) заменой этих компонент Фурье матричными элементами соответствующих переходов. Это правило (выражающее собой *принцип соответствия* Бора) является частным случаем общего соответствия между компонентами Фурье классических величин и квантовыми матричными элементами в квазиклассическом случае (§ 27). Излучение квазиклассично для переходов между состояниями с большими квантовыми числами; при этом энергия фотона $\hbar\omega = E_i - E_f$ мала по сравнению с энергиями излучателя E_i и E_f . Но точная (не связанная с предположением квазиклассичности) формула (97,5) имеет одинаковый вид как при малых, так и при произвольных значениях ω . Этим объясняется тот (в известном смысле случайный) факт, что принцип соответствия для интенсивности излучения оказывается справедливым не только в квазиклассическом, но и в общем квантовом случае.

§ 98. Мультипольное излучение

Вместо того чтобы говорить об испускании фотонов с заданным импульсом (т. е. в заданном направлении), рассмотрим теперь испускание фотонов с определенными значениями момента j . Тем самым выяснится также и более глубокий квантовомеханический смысл дипольного приближения.

Для испускания таких фотонов существуют строгие *правила отбора*, являющиеся следствием закона сохранения момента: начальный момент излучающей системы должен совпадать с суммарным моментом конечной системы и фотона. Согласно квантовомеханическому правилу сложения моментов это значит, что если начальный момент сис-

темы равен J_i , то после испускания фотона с моментом j момент системы может принимать лишь значения

$$J_f = J_i + j, \quad J_i + j - 1, \dots, |J_i - j|. \quad (98,1)$$

Определенному условию должны удовлетворять также и четности P_i и P_f начального и конечного состояний системы: начальная четность должна совпадать с общей четностью конечной системы и фотона, т. е. должно быть $P_i P_\phi = P_f$, где P_ϕ — четность фотона. Поскольку все четности могут иметь лишь значения ± 1 , то это условие можно записать также и в виде ¹⁾

$$P_i P_f = P_\phi. \quad (98,2)$$

Момент фотона пробегает целые значения, начиная с 1 (значение же $j=0$ невозможно). При любом таком значении правила (98,1) запрещают испускание одиночного фотона при переходе системы между двумя состояниями с $J=0$ (переходы $0 \rightarrow 0$). Радиационный переход между такими состояниями возможен лишь с одновременным испусканием двух фотонов с антипараллельными моментами (этот процесс, однако, возникает лишь в более высоких приближениях теории возмущений и потому сравнительно мало вероятен).

Для испускания фотона в состоянии 1^- (фотон $E1$ по введенной в § 78 терминологии) правила отбора (98,1—2) допускают переходы лишь между состояниями с противоположными четностями и со следующими возможными изменениями момента J излучателя:

$$J \rightarrow J+1, \quad J, \quad J-1 \quad (\text{при } J \geq 1); \quad (98,3)$$

$$\frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{2}, \quad \frac{1}{2}; \quad 0 \rightarrow 1.$$

Эти правила совпадают с правилами отбора для матричных элементов полярного вектора (§§ 18, 19). Именно таким вектором является электрический дипольный момент системы $\mathbf{d}$, матричные элементы которого определяют вероятность (97,4). Отсюда ясно, что дипольное приближение отвечает испусканию фотона 1^- .

Для испускания фотона 1^+ (фотон $M1$) правила отбора отличаются от электрически дипольных лишь правилом по четности: начальные и конечные состояния должны иметь

¹⁾ Правило отбора по четности было впервые установлено О. Лапортом (1924).

одинаковую четность. Это соответствует правилам отбора для матричных элементов аксиального вектора. Таковым является вектор магнитного дипольного момента системы, матричные элементы которого и определяют в этом случае вероятность испускания фотона. Отсюда и название такого излучения — магнитное дипольное.

Аналогичным образом, испускание всякого Ej -фотона определяется матричными элементами 2^j -польного электрического момента системы, а испускание Mj -фотона — матричными моментами 2^j -польного магнитного момента.

§ 99. Излучение атомов ¹⁾

Энергии внешних электронов атома (принимающих участие в оптических радиационных переходах) в грубой оценке имеют порядок величины $E \sim me^4/\hbar^2$, так что излучаемые длины волн $\lambda \sim \hbar c/E \sim \hbar^2/\alpha me^2$. Размеры же атома $a \sim \hbar^2/me^2$. Поэтому в оптических спектрах атомов, как правило, выполняется неравенство $a/\lambda \sim \alpha \ll 1$. Такой же порядок величины имеет отношение $v/c \sim \alpha$, где v — скорости оптических электронов.

Таким образом, в оптических спектрах атомов выполняется условие, в силу которого вероятность электрического дипольного излучения (если оно допускается правилами отбора) значительно превосходит вероятности мультипольных переходов более высоких рангов. В связи с этим в спектрах атомов наиболее важную роль играют именно $E1$ -переходы ²⁾.

Указанные в предыдущем параграфе правила отбора по полному моменту и четности электронной оболочки атома являются строгими ³⁾. Наряду с этими правилами могут существовать и другие, приближенные правила отбора,

¹⁾ В этом параграфе пользуемся обычными единицами.

²⁾ Типичные значения вероятности дипольных переходов в оптической области атомных спектров имеют порядок 10^8 сек^{-1} .

³⁾ Во избежание недоразумений отметим все же, что полный момент атома складывается из момента его электронной оболочки и спина ядра (в § 51 этот полный момент был обозначен через F). Наиболее строгие правила отбора должны относиться именно к этому моменту. Но ввиду чрезвычайной слабости взаимодействия электронов со спином ядра его влиянием на вероятности электронных переходов можно вовсе пренебречь, и тогда правила отбора будут относиться только к электронным характеристикам состояния атома.

справедливость которых связана с определенными свойствами, приближенно характеризующими некоторые категории атомных состояний.

Таковы, например, состояния, построенные по типу LS -связи (§ 51). Такие состояния характеризуются, помимо полного момента, также и определенными значениями сохраняющихся в этом случае орбитального момента L и спина S атома. Поскольку электрический дипольный момент представляет собой чисто орбитальную величину, то его оператор коммутативен с оператором спина, т. е. его матрица диагональна по числу S . Для матричных же элементов дипольного момента по отношению к волновым функциям орбитального движения электронов будут иметь место такие же правила отбора по числу L , как и для любого орбитального вектора (§ 18). Таким образом, переходы между состояниями, построенными по типу LS -связи, подчинены дополнительным правилам отбора:

$$\begin{aligned} S_f &= S_i, \\ L_f &= L_i \pm 1, \quad L_i, L_f \neq 0. \end{aligned} \quad (99,1)$$

Подчеркнем лишний раз, что эти правила — приближенные и справедливы лишь в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, нарушающим раздельное сохранение орбитального момента и спина.

В классической теории порядок величины магнитного момента системы (определенного согласно I (66,2)) связан с порядком величины ее же дипольного момента посредством $\mu \sim (v/c)d$. Такое же соотношение остается для атома и в квантовой теории. Действительно, магнитный момент атома по порядку величины дается боровским магнетоном: $\mu \sim e\hbar/mc$; эта оценка отличается множителем α от порядка величины дипольного момента $d \sim ea \sim \hbar^2/me$, а поскольку и $v/c \sim \alpha$, то отсюда и получается указанное соотношение между μ и d .

Вероятность магнитного дипольного ($M1$) излучения пропорциональна квадрату магнитного момента и, следовательно, примерно в α^2 раз меньше вероятности электрического дипольного излучения (той же частоты). Поэтому магнитное излучение фактически играет роль лишь для переходов, запрещенных правилами отбора электрического излучения.

То же самое относится и к электрическому квадрупольному ($E2$) излучению. Порядок величины электрического квадрупольного момента атома: ea^2 . Он содержит лишний множитель a по сравнению с дипольным моментом $d \sim ea$. Соответственно матричный элемент квадрупольного радиационного перехода содержит, по сравнению с матричным элементом дипольного перехода, лишний множитель $ka \sim a/\lambda$; с указанными выше порядками величины a и λ это — снова тот же малый множитель $\sim \alpha$.

Тот факт, однако, что этот множитель имеет различное происхождение в случаях излучений $M1$ и $E2$ (от v/c в первом или от a/λ во втором), приводит к тому, что в известных условиях излучение $M1$ может оказаться более вероятным, чем излучение $E2$ (при условии, конечно, что то и другое разрешены правилами отбора). Действительно, отношение их вероятностей

$$\frac{w(E2)}{w(M1)} \sim \frac{(a/\lambda)^2}{(v/c)^2} \sim \left(\frac{a\omega}{v}\right)^2 \sim \left(\frac{\Delta E}{E}\right)^2,$$

где $E \sim v\hbar/a$ — атомная энергия, а $\Delta E = \hbar\omega$ — изменение энергии атома при переходе. Мы видим, что это отношение ~ 1 , если $\Delta E \sim E$, но может быть мало, если $\Delta E \ll E$.

В частности, такой случай имеет место для переходов между компонентами сверхтонкой структуры одного и того же уровня (их частоты лежат в радиоволновой области). Эти переходы вообще не могут происходить как электрически дипольные, поскольку все компоненты сверхтонкой структуры, differing лишь суммой электронного и ядерного моментов, имеют одинаковую четность. Без изменения четности происходят переходы $E2$ и $M1$. Но ввиду относительно очень малой величины интервалов сверхтонкой структуры излучение $E2$ маловероятно по сравнению с $M1$, так что указанные переходы осуществляются как магнитно дипольные.

§ 100. Инфракрасная катастрофа

Столкновение двух заряженных частиц сопровождается, вообще говоря, испусканием фотонов (так называемое *тормозное излучение*). Возможные значения частоты фотона пробегают непрерывный ряд в интервале от нуля до всей кинетической энергии относительного движения сталкиваю-

щихся частиц. Рассмотрим некоторые свойства этого излучения в предельном случае малых частот.

Когда энергия фотона $\hbar\omega \rightarrow 0$, квантовомеханические формулы должны переходить в классические. При этом, конечно, речь должна идти о вычислении таких характеристик процесса излучения, которые формулируются независимо от понятия о фотоне. Таковой является полная интенсивность излучения, — полная энергия, теряемая на излучение сталкивающимися частицами.

Согласно классической теории, спектральное распределение энергии тормозного излучения стремится при $\omega \rightarrow 0$ к выражению вида

$$d\mathcal{E} = \text{const} \cdot d\omega, \quad (100,1)$$

где const — величина, не зависящая от ω (см. задачу 4 в I § 80, где рассмотрено нерелятивистское столкновение двух частиц с различными значениями отношения заряда к массе).

Хотя, согласно сказанному выше, этот предельный закон остается в силе и в квантовой теории, но здесь он имеет еще и другой аспект. Именно, излучение характеризуется не только своей полной энергией, но и числом испущенных фотонов. Число фотонов с частотами в интервале $d\omega$ получается делением $d\mathcal{E}$ на $\hbar\omega$ и, следовательно, в том же пределе имеет вид

$$dN = \text{const} \cdot \frac{d\omega}{\omega}. \quad (100,2)$$

Полное число испущенных фотонов получается интегрированием $dN/d\omega$ по $d\omega$. Мы видим, что интеграл расходится (логарифмически) на нижнем пределе ($\omega=0$). Другими словами, испускается бесконечно много фотонов с бесконечно малыми энергиями. Об этой ситуации говорят как об *инфракрасной катастрофе*.

Подчеркнем, что эта расходимость отражает реальную физическую ситуацию и не имеет ничего общего с теми фиктивными расходимостями, которые возникают как следствие несовершенства существующей теории. Происхождение инфракрасной расходимости связано с равенством нулю массы фотона, в силу чего его энергия может быть сколь угодно малой.

Хотя фотоны сколь угодно малых частот фактически не наблюдаемы, но инфракрасная расходимость имеет прин-

ципиальное значение. Строго говоря, всякое столкновение заряженных частиц сопровождается испусканием бесконечного числа мягких квантов, вероятность же столкновения без испускания фотонов вовсе, или с испусканием конечного числа их, равна нулю. В этом смысле можно сказать, что столкновение заряженных частиц не может быть строго упругим. При точном вычислении полной вероятности таких столкновений необходимо «обрезать» спектр испускаемых фотонов: надо условиться считать «упругими» все случаи, когда испускаются фотоны с частотами, не превосходящими некоторого малого, но конечного предела.

Задача 1)

Определить сечение тормозного излучения при пролетании электрона в поле неподвижного ядра с зарядом $+Ze$. Предполагается, что $v \ll c$, но в то же время $Ze^2/\hbar v \ll 1$, $Ze^2/\hbar v' \ll 1$, где v и v' — начальная и конечная скорости электрона (последние неравенства — условия применимости борновского приближения, в котором пренебрегается влиянием поля на волновые функции электрона до и после столкновения).

Решение. В соответствии с (97,4) сечение столкновений, в которых испускается фотон с энергией $\hbar\omega$, а электрон приобретает импульс $\mathbf{p}' = m\mathbf{v}'$, направленный в элементе телесных углов $d\Omega'$, определяется формулой

$$d\sigma = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 p'^2 dp' d\Omega'. \quad (1)$$

Дополнительный множитель $d^3p' = p'^2 dp' d\Omega'$ связан с тем, что конечное состояние (свободный электрон с импульсом $\mathbf{p}'$) относится к непрерывному спектру. Переход от вероятности (в (97,4)) к сечению осуществляется путем соответствующей нормировки волновой функции начального электрона, — на единичную плотность потока:

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}, \quad (2)$$

где $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ (ср. (21,6)). Волновая функция конечного электрона — плоская волна, нормированная на δ -функцию в импульсном пространстве:

$$\psi_f = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}}. \quad (3)$$

Частота испускаемого фотона связана с $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ уравнением сохранения энергии:

$$\hbar\omega = \frac{1}{2m} (p^2 - p'^2). \quad (4)$$

1) Пользуемся обычными единицами.

Вычисление матричного элемента дипольного момента электрона $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$ (в его движении относительно центра поля) надо, однако, производить не сразу по функциям (2) и (3), а лишь после учета уравнения движения в этом поле:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \nabla \frac{Ze^2}{r}.$$

В квантовой механике это уравнение надо понимать как связь между соответствующими операторами (ср. (21,2)). Взяв матричные элементы этих операторов, находим

$$m(\ddot{\mathbf{r}})_{fi} = -m\omega^2 \mathbf{r}_{fi} = Ze^2 \left(\nabla \frac{1}{r} \right)_{fi}.$$

Матричный элемент $\left(\nabla \frac{1}{r} \right)_{fi}$ по функциям (2), (3) сводится к компоненте Фурье

$$\left(\nabla \frac{1}{r} \right)_{\mathbf{q}} = \int \left(\nabla \frac{1}{r} \right) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV = i\mathbf{q} \left(\frac{1}{r} \right)_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi i \mathbf{q}}{q^2},$$

где $\hbar \mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$ и использована формула (68,6). В результате формула (1) дает

$$d\sigma = \frac{8}{3\pi} Z^2 \alpha \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{v' c^2 d\omega'}{v(v-v')^2 \omega}.$$

Для интегрирования по направлениям $\mathbf{v}'$ пишем

$$(\mathbf{v} - \mathbf{v}')^2 = v^2 + v'^2 - 2vv' \cos \theta, \quad d\omega' = 2\pi \sin \theta d\theta$$

и после интегрирования по $d\theta$ находим окончательно

$$d\sigma = \frac{16}{3} Z^2 \alpha \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{c^2}{v^2} \ln \frac{v + v'}{v - v'} \frac{d\omega}{\omega}.$$

Инфракрасной катастрофе отвечает расходимость этого выражения при $\omega \rightarrow 0$.

§ 101. Рассеяние света

Рассеяние фотона атомом представляет собой поглощение начального фотона (с импульсом $\mathbf{k}$) с одновременным испусканием другого фотона $\mathbf{k}'$. При этом атом может остаться либо на начальном, либо на каком-то другом уровне энергии. В первом случае частота фотона не меняется (*релеево-ское* или *несмещенное* рассеяние), а во втором — меняется на величину

$$\omega' - \omega = E_i - E_f, \quad (101,1)$$

где E_i и E_f — начальная и конечная энергии атома (*комбинационное* или *смещенное* рассеяние). Если вначале атом находился на основном уровне, то частота может изменяться

лишь в сторону уменьшения. При рассеянии же на возбужденном атоме конечный уровень может лежать как выше, так и ниже начального, в связи с чем комбинационное рассеяние может приводить как к уменьшению, так и увеличению частоты.

Поскольку оператор электромагнитного взаимодействия не имеет матричных элементов для переходов с одновременным изменением двух фотонных чисел заполнения, то эффект рассеяния появляется лишь во втором приближении теории возмущений. Его надо рассматривать как происходящий через определенные промежуточные состояния, которые могут быть двух типов:

I. Фотон k поглощается, атом переходит с начального уровня E_i на один из других своих возможных уровней E_n ; при последующем переходе в конечное состояние испускается фотон k' .

II. Испускается фотон k' , атом переходит в состояние E_n , при переходе в конечное состояние поглощается фотон k .

Согласно (36,2) роль матричного элемента для рассматриваемого процесса играет сумма

$$V_{fi} = \sum_n' \left(\frac{V'_{fn} V_{ni}}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_n^I} + \frac{V_{fn} V'_{ni}}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_n^{II}} \right). \quad (101,2)$$

Здесь $\mathcal{E}_i = E_i + \omega$ — начальная энергия системы «атом + фотон», а $\mathcal{E}_n^I$ и $\mathcal{E}_n^{II}$ — энергии двух указанных типов промежуточных состояний:

$$\mathcal{E}_n^I = E_n, \quad \mathcal{E}_n^{II} = E_n + \omega + \omega';$$

V_{ni} и V'_{fn} — матричные элементы переходов с поглощением, а V'_{fn} и V'_{ni} — с испусканием фотона; из суммирования по n исключается начальное состояние атома (что отмечено штрихом у знака суммы).

Наша задача состоит в вычислении сечения процесса рассеяния. Это можно сделать с помощью той же формулы (95,14), которая была использована ранее для вычисления вероятности спонтанного испускания. Действительно, отличие состоит лишь в том, что «излучателем» для испускания фотона ω' является теперь не изолированный атом, а система из атома вместе с падающим на него фотоном ω . Переход от вероятности к сечению осуществляется просто делением вероятности на плотность потока падающих на атом фото-

нов. Волновой функции фотона, нормированной на «1 фотон в объеме Ω », соответствует плотность потока, равная c/Ω — произведению скорости c на плотность числа фотонов $1/\Omega$. В релятивистских единицах $c=1$, и, таким образом, сечение вычисляется по формуле

$$d\sigma = \frac{\Omega^2}{4\pi^2} |V_{fi}|^2 \omega'^2 d\omega', \quad (101,3)$$

где $d\omega'$ — элемент телесного угла для направлений рассеянного фотона.

Будем считать, что длины волн начального и конечного фотонов велики по сравнению с размерами рассеивающего атома. Тогда для матричных элементов всех переходов можно воспользоваться дипольным приближением. Согласно (97,2) и (97,2a)

$$V_{ni} = -i \sqrt{\frac{2\pi\omega}{\Omega}} (\mathbf{e} \mathbf{d}_{ni}), \quad V'_{fn} = i \sqrt{\frac{2\pi\omega'}{\Omega}} (\mathbf{e}'^* \mathbf{d}_{fn})$$

и аналогично для V'_{ni} и V_{fn} ($\mathbf{e}$ и $\mathbf{e}'$ — векторы поляризации фотонов ω и ω').

Подставив все эти выражения в (101,2) и затем в (101,3), получим сечение рассеяния ¹⁾

$$d\sigma = |A_{fi}|^2 \frac{\omega\omega'^3}{\hbar^2 c^2} d\omega', \quad (101,4)$$

где амплитуда рассеяния

$$A_{fi} = \sum_n \left\{ \frac{(\mathbf{d}_{fn} \mathbf{e}'^*) (\mathbf{d}_{ni} \mathbf{e})}{\omega_{ni} - \omega} + \frac{(\mathbf{d}_{fn} \mathbf{e}) (\mathbf{d}_{ni} \mathbf{e}'^*)}{\omega_{nf} + \omega} \right\}, \quad (101,5)$$

$$\hbar\omega_{ni} = E_n - E_i, \quad \hbar\omega_{nf} = E_n - E_f,$$

эта формула была получена Г. Крамерсом и В. Гейзенбергом (1925). Суммирование по n производится по всем возможным состояниям атома, включая состояния непрерывного спектра (при этом состояния i и f автоматически выпадают из суммирования, поскольку диагональные матричные элементы $\mathbf{d}_{ii} = \mathbf{d}_{ff} = 0$, — см. § 54) ²⁾.

¹⁾ Здесь и ниже пользуемся обычными единицами.

²⁾ Формула (101,4—5) не применима в случае резонанса, когда частота ω близка к одной из частот ω_{ni} или ω_{fn} . В этом случае (так называемая резонансная флуоресценция) должна быть учтена естественная ширина спектральных линий (§ 102).

Легко видеть, что амплитуда рассеяния отлична от нуля только для переходов между состояниями одинаковой четности (в том числе для совпадающих состояний i и f). Действительно, матричные элементы вектора $\mathbf{d}$ отличны от нуля только для переходов между состояниями разной четности; поэтому четности состояний i и f должны быть противоположны четности одного и того же (в каждом члене суммы в (101,5)) состояния n , а потому одинаковы между собой. Это правило противоположно правилу отбора по четности при излучении (электрически дипольном), так что имеет место, как говорят, альтернативный запрет: переходы, разрешенные в излучении, запрещены в рассеянии, а разрешенные в рассеянии — запрещены в излучении.

При $\omega \rightarrow 0$ амплитуда рассеяния стремится к конечному пределу. Сечение несмещенного рассеяния ($\omega' = \omega$) при малых ω оказывается поэтому пропорциональным ω^4 .

В обратном случае, когда частота ω велика по сравнению со всеми существенными в сумме (101,5) частотами ω_{ni} , ω_{nf} (но, конечно, по-прежнему длина волны велика по сравнению с атомными размерами), мы должны вернуться к формулам классической теории.

Действительно, вычисление первого исчезающего члена разложения амплитуды (101,5) по степеням $1/\omega$ (на котором мы не будем останавливаться) приводит к сечению рассеяния

$$d\sigma = Z^2 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |\mathbf{e}'^* \mathbf{e}|^2 d\omega', \quad (101,6)$$

где Z — число электронов в атоме. Просуммировав (101,6) его по поляризациям рассеянного фотона $\mathbf{e}'$, мы придем к классической формуле Томсона I (84,10).

Рассмотрим рассеяние света совокупностью N одинаковых атомов, расположенных в объеме, размеры которого малы по сравнению с длиной волны. Амплитуда рассеяния такой совокупностью будет равна сумме амплитуд рассеяния каждым из атомов. При этом, однако, надо учесть, что волновые функции (с помощью которых вычисляются матричные элементы дипольного момента) для нескольких одинаковых атомов, рассматриваемых одновременно, нельзя считать просто одинаковыми. Волновые функции по самому своему существу определены лишь с точностью до произвольного фазового множителя, и эти множители у каждого атома

свои. Сечение рассеяния должно быть усреднено по фазовым множителям каждого атома независимо.

Амплитуда рассеяния A_{fi} каждого атома содержит множитель $\exp \{i(\varphi_i - \varphi_f)\}$, где φ_i, φ_f — фазы волновых функций начального и конечного состояний. Для смещенного рассеяния состояния i и f различны, и этот множитель отличен от единицы. В квадрате модуля $|\sum A_{fi}|^2$, определяющем сечение рассеяния (сумма — по всем N атомам), произведения членов суммы, относящихся к различным атомам, будут содержать фазовые множители, которые обратятся в нуль при усреднении по фазам атомов; останутся лишь квадраты модулей каждого из членов. Это значит, что полное сечение рассеяния N атомами получится умножением на N сечения рассеяния на одном атоме, — складываются сечения рассеяния, а не его амплитуды. В таком случае говорят, что рассеяние *некогерентно*.

Если же начальное и конечное состояния атома совпадают, то множители $\exp \{i(\varphi_i - \varphi_f)\} = 1$. Множителем N будет отличаться в этом случае амплитуда рассеяния от амплитуды рассеяния на отдельном атоме, сечение же рассеяния — соответственно множителем N^2 . В таком случае говорят, что рассеяние *когерентно*.

Когерентное рассеяние во всяком случае является несмещенным; обратное утверждение, однако, не обязательно справедливо. Несмещенное рассеяние целиком когерентно, лишь если рассеивающий атом находится на невырожденном уровне энергии. Если же уровень энергии вырожден, то будет иметься также некогерентное несмещенное рассеяние, происходящее от переходов атома между различными взаимно вырожденными состояниями. Подчеркнем, что некогерентность несмещенного рассеяния представляет собой чисто квантовый эффект. В классической теории рассеяние без изменения частоты тем самым когерентно (именно так и было определено понятие когерентности рассеяния в I § 84).

§ 102. Естественная ширина спектральных линий

До сих пор при изучении испускания и рассеяния света мы рассматривали все уровни системы (скажем, атома) как строго дискретные. Между тем возбужденные уровни, имея вероятность высветиться, обладают конечным временем

жизни. Это приводит к тому, что уровни становятся квазидискретными, приобретая малую, но конечную ширину; они записываются в виде $E - i\Gamma/2$, где Γ ($\Gamma/\hbar$ в обычных единицах) — вероятность (в 1 сек) всех возможных процессов «распада» данного состояния (§ 38)¹⁾.

Рассмотрим вопрос о том, каким образом это обстоятельство сказывается на процессе излучения. Заранее ясно, что ввиду конечности ширины уровня испущенный свет окажется не строго монохроматическим: частоты будут разбросаны в интервале $\Delta\omega \sim \Gamma$. Но чтобы измерить распределение фотонов по частотам с такой точностью, необходимо время $T \gg 1/\Delta\omega \sim 1/\Gamma$. За это время уровень с подавляющей вероятностью высветится. Поэтому речь должна идти о полной вероятности испускания фотона данной частоты, а не о вероятности в единицу времени. Вычислим эту вероятность для случая перехода атома с некоторого возбужденного уровня $E_i - i\Gamma_i/2$ на основной уровень (E_f), обладающий бесконечным временем жизни и потому строго дискретный. Для упрощения рассуждений будем при этом предполагать, что этот переход — единственный способ излучения с данного возбужденного уровня.

Вернемся к произведенному в § 35 выводу формулы для вероятности перехода (35,6) (с помощью которой в § 95 вычислялась вероятность излучения). Напомним, что мы рассматривали функцию $a_{fi}(t)$ при больших временах t , и отношение $|a_{fi}|^2/t$ давало искомую вероятность перехода в единицу времени. Мы можем теперь уточнить смысл этой процедуры: она относится к временам, малым по сравнению с продолжительностью жизни возбужденного уровня; большие t означают при этом времена, большие по сравнению с периодом $1/(E_i - E_f)$, но все же малые по сравнению с $1/\Gamma$. Именно поэтому можно было пренебречь существованием конечной ширины уровня. Теперь же, когда нам предстоит рассмотреть времена, сравнимые с $1/\Gamma$, шириной возбужденного уровня уже нельзя пренебрегать.

В задаче об излучении мы имеем дело с системой атом + фотоны; соответственно этому и в выражении (35,2) роль частоты перехода ω_{fi} играет разность $E_f + \omega - E_i$.

¹⁾ Радиационная ширина уровней фактически очень мала. Так, вероятности распада $\omega \sim 10^8 - 10^9 \text{ сек}^{-1}$ отвечает ширина $\Gamma \sim 10^{-6} - 10^{-7} \text{ эв}$.

Написав теперь начальный уровень атома в виде $E_i - i\Gamma_i/2$, получим

$$a_{fi}(t) = V_{fi} \frac{1 - \exp \{ i(E_f + \omega - E_i)t - (\Gamma_i/2)t \}}{E_f - E_i + \omega + i\Gamma_i/2}. \quad (102,1)$$

Искомая полная (за все время) вероятность перехода определяется предельным значением квадрата $|a_{fi}(t)|^2$ при $t \rightarrow \infty$. Для испускания фотона с частотами в интервале $d\omega$ и направлениями в телесном угле $d\Omega$ она равна

$$dW = |a_{fi}(\infty)|^2 \frac{\Omega \omega^2 d\omega d\Omega}{(2\pi)^3} \quad (102,2)$$

(где Ω , как и в (95,13), — нормировочный объем для волновой функции фотона). Подставив сюда (102,1), получим

$$dW = \frac{\Omega \omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3} |V_{fi}|^2 \frac{d\omega}{[\omega - (E_i - E_f)]^2 + \Gamma_i^2/4}.$$

Интересуясь лишь спектральным распределением вероятности испускания, проинтегрируем это выражение по направлениям фотона. Согласно (95,14) интеграл

$$\int \frac{\Omega \omega^2}{(2\pi)^3} |V_{fi}|^2 d\Omega = \frac{\omega}{2\pi},$$

где ω — полная обычная (отнесенная к единице времени) вероятность излучения, совпадающая, по определению, с Γ_i . Таким образом, окончательно находим

$$dW = \frac{\Gamma_i}{2\pi} \frac{d\omega}{[\omega - (E_i - E_f)]^2 + \Gamma_i^2/4}. \quad (102,3)$$

Интегрирование этого выражения по всем частотам, от $-\infty$ до ∞ , дает 1 — в соответствии с тем, что за бесконечное время атом заведомо испустит фотон той или иной частоты.

Формула (102,3) определяет, как говорят, *форму спектральной линии* — распределение интенсивности по ее ширине. Форма линии, описываемая формулой (102,3), свойственна изолированному атому; ее называют *естественной* ¹⁾.

¹⁾ В отличие от уширения линии, связанного со взаимодействием излучающего атома с другими атомами (уширение столкновениями) или с наличием в источнике света атомов, движущихся с различными скоростями (доплеровское уширение).

Глава XVI

ДИАГРАММЫ ФЕЙНМАНА

§ 103. Матрица рассеяния

Уже говорилось (§ 75) о том, что типичная постановка задачи в релятивистской квантовой теории состоит в определении амплитуд вероятностей различных процессов рассеяния — переходов между различными состояниями системы свободных частиц. Эту задачу можно считать в настоящее время в принципе решенной в рамках квантовой электродинамики, т. е. для процессов, обусловленных электромагнитным взаимодействием. Слабость этого взаимодействия (выражающаяся малостью постоянной тонкой структуры α) дает возможность рассматривать такие процессы с помощью теории возмущений. В своей обычной (для нерелятивистской квантовой механики) форме аппарат этой теории обладает, однако, тем недостатком, что в нем не выявляются явным образом требования релятивистской инвариантности. Этот недостаток устранен в последовательной релятивистской теории возмущений, построенной *Ричардом Фейнманом* (1948). Аппарат этой теории в чрезвычайной степени упрощает вычисления, которые могли бы даже оказаться практически невыполнимыми в обычной форме теории возмущений. Более того, он дает возможность однозначным образом устранять появляющиеся в процессе вычислений расходимости интегралов, о которых упоминалось уже в § 75 ¹⁾.

¹⁾ Изложение в этой главе имеет своей целью дать лишь понятие об основных идеях теории, о происхождении и смысле фигурирующих в ней понятий и величин. Поэтому необходимые вычисления не воспроизводятся полностью; их ход лишь намечается с целью выяснения лежащих в их основе идей.

Покажем прежде всего, каким образом строится наиболее общее выражение амплитуд рассеяния для произвольных процессов.

Имея в виду вторично квантованное описание системы частиц, вводим ее волновую функцию, в которой независимыми переменными являются числа заполнения состояний свободных частиц; обозначим эту функцию символом Φ (с целью подчеркнуть ее отличие от обычных, координатных, волновых функций). Гамильтониан системы представим в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где $\hat{H}_0$ — гамильтониан свободных частиц, а $\hat{V}$ — оператор электромагнитного взаимодействия. Функция Φ подчиняется волновому уравнению

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Phi. \quad (103,1)$$

Здесь подразумевается обычное (шредингеровское) представление операторов и волновых функций: операторы от времени не зависят, а временная эволюция системы описывается временной зависимостью волновой функции.

В § 76 было уже указано, что возможна и другая формулировка аппарата квантовой механики, в которой явная зависимость от времени перенесена с волновых функций на операторы; в этом (гейзенберговском) представлении волновые функции от времени вообще не зависят. Для стоящей сейчас перед нами задачи наиболее естественно, однако, некоторое «промежуточное» представление, в котором на операторы перенесена не вся временная зависимость, а лишь та, которая соответствует состоянию системы свободных частиц. Другими словами, в этом представлении (его называют *представлением взаимодействия*) волновая функция зависит от времени, но эта зависимость целиком связана лишь с действием возмущения, т. е. отвечает как раз интересующим нас процессам рассеяния, происходящим благодаря взаимодействию частиц.

Соответственно сказанному, волновое уравнение для функции Φ в представлении взаимодействия имеет вид

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \hat{V}(t) \Phi, \quad (103,2)$$

отличаясь от (103,1) отсутствием $\hat{H}_0$ в правой стороне. У оператора $\hat{V}(t)$ мы указываем аргумент t с целью подчеркнуть, что в рассматриваемом представлении он зависит от

времени — в противоположность не зависящему от времени шредингеровскому оператору $\hat{V}$ в (103,1).

Если $\Phi(t)$ и $\Phi(t+\delta t)$ — значения Φ в два бесконечно близких момента времени, то в силу (103,2) они связаны друг с другом посредством

$$\Phi(t+\delta t) = [1 - i\delta t \cdot \hat{V}(t)] \Phi(t),$$

или с той же точностью $\Phi(t+\delta t) = e^{-i\delta t \cdot \hat{V}(t)} \Phi(t)$. Применяя эту формулу к последовательным интервалам времени δt_n от $t=-\infty$ до $t=+\infty$, можно выразить конечное значение $\Phi(+\infty)$ через начальное $\Phi(-\infty)$. Обозначив оператор, связывающий эти значения, через $\hat{S}$, имеем $\Phi(+\infty) = \hat{S}\Phi(-\infty)$, где

$$\hat{S} = \prod_n e^{-i\delta t_n \cdot \hat{V}(t_n)}, \quad (103,3)$$

а знак $\prod$ означает предел произведения по всем интервалам δt_n . Если бы $V(t)$ было обычной функцией, то этот предел сводился бы просто к

$$\exp\left(-i \sum_n \delta t_n \cdot V(t_n)\right) = \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V(t) dt\right).$$

Но такое сведение основано на коммутативности множителей, взятых в различные моменты времени, подразумевающейся при переходе от произведения в (103,3) к суммированию в экспоненте. Для оператора $\hat{V}(t)$ такой коммутативности, вообще говоря, нет и сведение к обычному интегралу невозможно.

Напишем (103,3) в символическом виде:

$$\hat{S} = \hat{T} \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{\infty} \hat{V}(t) dt \right\}, \quad (103,4)$$

где $\hat{T}$ — *хронологический оператор*, означающий определенную («хронологическую») последовательность моментов времени в последовательных множителях произведения (103,3). Сама по себе такая запись имеет, конечно, лишь чисто символический характер. Она дает, однако, возможность легко написать ряд, представляющий собой

разложение $\hat{S}$ по степеням возмущения:

$$\hat{S} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_k \hat{T} \{ \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_k) \}. \quad (103,5)$$

Здесь в каждом члене k -я степень интеграла написана в виде k -кратного интеграла, а оператор $\hat{T}$ означает, что в каждой области значений переменных $t_1, t_2, \dots, t_k$ надо располагать множители $\hat{V}(t_1), \hat{V}(t_2), \dots, \hat{V}(t_k)$ в хронологическом порядке: справа налево в порядке возрастания значений t . Поскольку операция хронологизации относится теперь просто к произведению (а не к экспоненциальному выражению, как в (103,4)), то выражение каждого члена суммы (103,5) имеет уже реальный, а не символический характер.

Из определения оператора $\hat{S}$ очевидно, что если до столкновения система находилась в состоянии Φ_i (некоторая совокупность свободных частиц), то амплитуда вероятности ее перехода в состояние Φ_f (другая совокупность свободных частиц) есть матричный элемент S_{fi} . Действительно, по определению матричных элементов оператора, функция $\Phi(\infty) = \hat{S}\Phi_i$ может быть представлена в виде разложения

$$\Phi(\infty) = \sum_f S_{fi} \Phi_f$$

(ср. (11,11)); квадрат $|S_{fi}|^2$ есть, следовательно, вероятность системе оказаться при $t \rightarrow \infty$ (т. е. после процесса взаимодействия) в конечном состоянии Φ_f . Оператор $\hat{S}$ называют *оператором рассеяния*, а о совокупности его матричных элементов говорят как о *матрице рассеяния* или *S-матрице* (этот термин был уже упомянут в § 75). Недиagonальные ($i \neq f$) элементы этой матрицы являются амплитудами процессов рассеяния $i \rightarrow f$ ¹⁾.

Для придания формуле (103,5) вполне конкретного смысла надо еще установить общий вид оператора взаимодействия $\hat{V}(t)$, обнимающего в себе все возможные электродинамические процессы. Это легко сделать путем прямого обобщения формул, написанных уже в § 95. В этом параграфе

¹⁾ Вывод правил релятивистской теории возмущений с помощью разложения (103,5) принадлежит Ф. Дайсону.

было подвергнуто вторичному квантованию только электромагнитное поле, представленное в (95,1) оператором $\hat{A}$. Теперь надо перейти ко вторичному квантованию также и для электронно-позитронного поля. Этот переход осуществляется просто заменой волновых функций электрона в матричных элементах (95, 5—6) соответствующими Ψ -операторами. Таким образом, приходим к выражению

$$\hat{V}(t) = -e \int \hat{j} \hat{A} d^3x, \quad (103,6)$$

где $\hat{j} = \hat{\Psi}^* \alpha \hat{\Psi}$ — вторично квантованный оператор плотности тока частиц ($d^3x = dx dy dz$ — элемент объема).

В (103,6) фигурируют трехмерные векторы $\hat{j}$ и $\hat{A}$, что связано со специальным выбором калибровки потенциалов поля, которой мы до сих пор пользовались: калибровка с равным нулю скалярным потенциалом. Имея в виду получение релятивистски инвариантных выражений, надо перейти к четырехмерной форме записи

$$\hat{V}(t) = e \int \hat{j}^\mu \hat{A}_\mu d^3x, \quad (103,7)$$

где $\hat{j}^\mu = \hat{\Psi} \gamma^\mu \hat{\Psi}$ — оператор 4-вектора плотности тока, а $\hat{A}_\mu$ — оператор 4-потенциала, в котором заранее не предопределен выбор калибровки (при $\hat{A}^\mu = (0, \hat{A})$ (103,7) переходит в (103,6)). Вид оператора $\hat{A}^\mu$ отличается от (76,15) лишь заменой вектора поляризации фотонов $\mathbf{e}$ на единичный 4-вектор e^μ (который сводится к $e^\mu = (0, \mathbf{e})$ лишь при специальной калибровке)¹⁾:

$$\hat{A}^\mu = \sum_k \sqrt{\frac{2\pi}{\Omega\omega}} (\hat{c}_k e^\mu e^{-i(kx)} + \hat{c}_k^\dagger e^{\mu*} e^{i(kx)}). \quad (103,8)$$

¹⁾ Для краткости, везде опускаем индексы, указывающие поляризацию частиц. В этой главе мы будем часто пользоваться способом условной записи 4-векторов светлыми буквами без индексов $\mu, \nu, \dots$, нумерующих их компоненты. Так, x и p обозначают 4-векторы $x^\mu = (t, \mathbf{r})$ и $p^\mu = (e, \mathbf{p})$. При этом скалярные произведения 4-векторов записываются тоже без индексов. Так, $(px) = p_\mu x^\mu = et - \mathbf{p}\mathbf{r}$; равенство $p_\mu p^\mu = m^2$ для 4-импульса частицы с массой m записывается в виде $p^2 = m^2$; равенство $k_\mu k^\mu = 0$ для 4-импульса фотона — в виде $k^2 = 0$ и т. п. Такой способ записи широко используется в современной литературе. Этот компромисс между алфавитными ресурсами и нуждами физики требует, конечно, от читателя повышенного внимания.

Выражения Ψ -операторов через операторы рождения и уничтожения электронов и позитронов даются формулами (85,3). Напишем их в виде

$$\hat{\Psi} = \sum_p (\hat{a}_p \Psi_p + \hat{b}_p^+ \Psi_{-p}), \quad \hat{\bar{\Psi}} = \sum_p (\hat{a}_p^+ \bar{\Psi}_p + \hat{b}_p \bar{\Psi}_{-p}), \quad (103,9)$$

где функции Ψ_p — плоские волны с 4-импульсами p :

$$\Psi_p = (1/\Omega) u(p) e^{-i(p x)}. \quad (103,10)$$

Обратим внимание на то, что временная зависимость операторов (103,8—9), а с ними и оператора взаимодействия (103,7), переносится на них с волновых функций свободного движения частиц — плоских волн. Другими словами, эти операторы написаны как раз в требуемом представлении — в представлении взаимодействия.

§ 104. Диаграммы Фейнмана

Путь вычисления элементов матрицы рассеяния проиллюстрируем на конкретных примерах.

Рассмотрим процессы, возникающие во втором приближении теории возмущений. Им соответствует член второго порядка в разложении (103,5) ($k=2$); подставив, напишем этот член в виде

$$\hat{S}^{(2)} = -\frac{e^2}{2} \iint d^4x d^4x' \hat{T} \{ \hat{j}^\mu(x) \hat{A}_\mu(x) \hat{j}^\nu(x') \hat{A}_\nu(x') \}. \quad (104,1)$$

где $d^4x = dt d^3x$ — элемент 4-объема. Обратим внимание на релятивистски инвариантный характер этой формулы: произведения $(\hat{j}\hat{A})$ — 4-скаляры; скалярной же операцией является и интегрирование по 4-объему¹⁾.

В качестве первого примера рассмотрим упругое рассеяние двух электронов: в начальном состоянии имеем два электрона с 4-импульсами p_1 и p_2 , а в конечном — два электрона с другими 4-импульсами p_3 и p_4 . Поскольку фотонные и электронные операторы действуют на различные переменные (фотонные и электронные числа заполнения), их матричные элементы вычисляются независимо. В данном

¹⁾ Мы не останавливаемся на рассуждениях, доказывающих, что релятивистская инвариантность не нарушается также и операцией хронологизации.

случае в начальном и конечном состояниях фотонов вообще нет. Поэтому по отношению к фотонным операторам $\hat{A}_\mu(x) \hat{A}_\nu(x')$ нужный нам матричный элемент есть диагональный элемент $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$, где символ $|0\rangle$ обозначает состояние электромагнитного поля без фотонов или, как говорят, состояние *фотонного вакуума*. Этот матричный элемент представляет собой определенную функцию 4-координат x и x' . При этом в силу однородности пространства и времени эта функция может зависеть только от пространственного $(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ и временного $(t-t')$ интервалов, т. е. только от разности $x-x'$, а не от значений x и x' в отдельности. Таким образом, появляется одно из основных новых понятий излагаемой теории — так называемая *фотонная функция распространения* или *фотонный пропагатор*¹⁾, определяемый как

$$D_{\mu\nu}(x-x') = \begin{cases} i \langle 0 | A_\mu(x) A_\nu(x') | 0 \rangle & \text{при } t' < t, \\ i \langle 0 | A_\nu(x') A_\mu(x) | 0 \rangle & \text{при } t < t' \end{cases} \quad (104,2)$$

(разный порядок множителей при $t' < t$ и $t < t'$ связан с действием оператора $\hat{T}$ в (104,1)).

Рассмотрим, далее, электронные операторы в (104,1). Каждый из двух фигурирующих здесь операторов тока есть произведение $\hat{j} = \hat{\bar{\Psi}} \gamma \hat{\Psi}$, а каждый из Ψ -операторов дается суммой (103,9). Поэтому произведение $\hat{j}^\mu(x) \hat{j}^\nu(x')$ представится суммой членов, каждый из которых содержит произведение каких-либо четырех из операторов $\hat{a}_p, \hat{a}_p^+, \hat{b}_p, \hat{b}_p^+$. Отличный от нуля вклад в нужный нам матричный элемент дадут те из этих членов, в которых операторы обеспечивают уничтожение начальных электронов p_1, p_2 и рождение конечных электронов p_3, p_4 . Другими словами, это будут те члены, которые содержат произведение операторов $\hat{a}_{p_1}, \hat{a}_{p_2}, \hat{a}_{p_3}^+, \hat{a}_{p_4}^+$. Проведенное таким путем вычисление приводит к результату:

$$S_{fi} = ie^2 \iint d^4x d^4x' D_{\mu\nu}(x-x') \{ (\bar{\Psi}_4 \gamma^\mu \Psi_2) (\bar{\Psi}_3 \gamma^\nu \Psi_1) - (\bar{\Psi}_4 \gamma^\mu \Psi_1) (\bar{\Psi}_3 \gamma^\nu \Psi_2) \}, \quad (104,3)$$

где $\Psi_1 = \Psi_{p_1}(x)$, $\Psi'_1 = \Psi_{p_1}(x')$ и т. д.

¹⁾ От английского слова propagation — распространение.

Электронные волновые функции — плоские волны (103,10). Поэтому, например, первый член в фигурных скобках в (104,3) содержит экспоненциальный множитель

$$e^{-i((p_2-p_4)x)-(p_1-p_3)x'}.$$

Но в силу закона сохранения 4-импульса при столкновении $p_1+p_2=p_3+p_4$, а потому $p_2-p_4=p_3-p_1$. Написанный множитель превращается в

$$e^{i((p_4-p_2)(x-x'))}$$

и интегрирование по $d^4(x-x')$ в (104,3) означает взятие компоненты разложения функции $D_{\mu\nu}(x-x')$ в четырехмерный интеграл Фурье, отвечающей 4-импульсу $k=p_4-p_2$. Определяемую таким разложением функцию

$$D_{\mu\nu}(k) = \int D_{\mu\nu}(x-x') e^{i(k(x-x'))} d^4(x-x') \quad (104,4)$$

называют *фотонным пропагатором в импульсном представлении*.

Таким же образом преобразуется второй член в (104,3) и в результате получается

$$S_{fi} \sim e^2 (\bar{u}_4 \gamma^\mu u_2) D_{\mu\nu}(k) (\bar{u}_3 \gamma^\nu u_1) - e^2 (\bar{u}_4 \gamma^\nu u_1) D_{\mu\nu}(k') (\bar{u}_3 \gamma^\mu u_2), \quad (104,5)$$

где $k=p_4-p_2$, $k'=p_4-p_1$ ¹⁾. Первый и второй члены этой амплитуды рассеяния могут быть символически представлены в виде так называемых *диаграмм Фейнмана* (рис. 14).

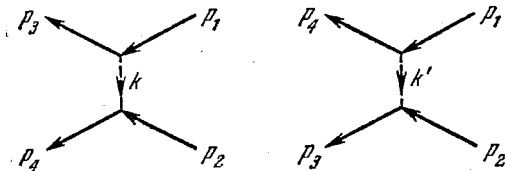


Рис. 14.

Каждой из точек пересечения линий (*вершине*) диаграммы сопоставляется множитель $e\gamma^\mu$. «Входящие» сплошные

¹⁾ Нас интересует только характер математической структуры элементов S -матрицы. Поэтому мы опускаем не влияющие на нее общие множители. Мы не будем также останавливаться на способе преобразования квадрата $|S_{fi}|^2$ в наблюдаемую величину — сечение рассеяния.

линии, направленные к вершине, отвечают начальным электронам; им сопоставляются множители u — биспинорные амплитуды соответствующих электронных состояний. «Выходящие» сплошные линии, направленные от вершин, — конечные электроны; этим линиям сопоставляются множители $\bar{u}$. При «прочтении» диаграммы указанные множители записываются слева направо в порядке, соответствующем передвижению вдоль сплошных линий против направления стрелок. Обе вершины соединены пунктирной линией, отвечающей *виртуальному* (промежуточному) *фотону*, «испускаемому» в одной вершине и «поглощаемому» в другой; этой линии сопоставляется множитель $D_{\mu\nu}(k)$. 4-импульс виртуального фотона (k или k') определяется «сохранением 4-импульса в вершине»: равенством суммарных импульсов входящих и выходящих линий. Линии, отвечающие начальным и конечным частицам, называют *внешними линиями* или *свободными концами* диаграммы. Две диаграммы на рис. 14 отличаются друг от друга обменом двух свободных концов.

Подчеркнем, что квадрат 4-импульса виртуального фотона $k^2 \equiv k_\mu k^\mu$ отнюдь не равен нулю, как это должно было бы быть для реального фотона. В этой связи подчеркнем также, что описание процесса (в соответствии с видом диаграмм) как испускание виртуального фотона с последующим его поглощением не имеет, конечно, буквального смысла и является лишь удобным способом словесного описания структуры выражений, входящих в амплитуду рассеяния.

Рассмотрим теперь взаимное рассеяние электрона и позитрона. Их начальные 4-импульсы обозначим через p_- и p_+ , а конечные — через p'_- и p'_+ . Как должны быть изменены в этом случае диаграммы — ясно уже из характера структуры Ψ -операторов (103,9): в эти выражения операторы рождения и уничтожения позитронов входят вместе соответственно с операторами уничтожения и рождения электронов, а в качестве коэффициентов при них фигурируют $\bar{u}(-p)$ и $u(-p)$ вместо $u(p)$ и $\bar{u}(p)$. Отсюда следует, что вместо диаграмм, изображенных на рис. 14, будем иметь диаграммы, представленные на рис. 15. Правила составления диаграмм поменяются лишь в отношении позитронов. По-прежнему входящим сплошным линиям сопоставляется множитель u , а выходящим $\bar{u}$. Но теперь входящие концы отвечают конечным, а выходящие — начальным позитронам, причем 4-импульсы всех позитронов

берутся с обратным знаком. Обратим внимание на различный характер двух диаграмм на рис. 15. Первая из них имеет такой же характер, что и диаграммы на рис. 14: в одной из вершин пересекаются линии начального и конечного электронов, а в другой — то же самое для позитронов (диаграмма «рассеивательного» типа). Во второй же диаграмме в каждой из вершин пересекаются линии электронов и позитронов — начальных и конечных, в верхней вершине как бы

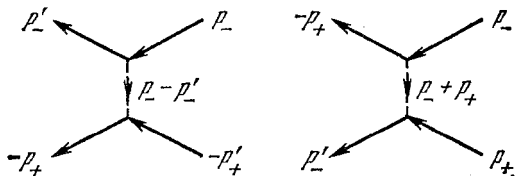


Рис. 15.

происходит аннигиляция пары с испусканием виртуального фотона, а в нижней — рождение пары из фотона (диаграмма «аннигиляционного» типа).

Перейдем к другому эффекту второго порядка — рассеянию фотона на электроне (*эффект Комптона*). Пусть в начальном состоянии фотон и электрон имеют 4-импульсы k_1 и p_1 , а в конечном k_2 и p_2 .

В соответствующем элементе S -матрицы операторы $\hat{A}_\mu(x) \hat{A}_\nu(x')$ в (104,1) обеспечивают (за счет содержащихся в них операторов $\hat{c}_{k_1}$ и $\hat{c}_{k_2}^+$) уничтожение фотона k_1 и рождение фотона k_2 . Уничтожение электрона p_1 и рождение электрона p_2 обеспечивается одной из двух пар операторов $\hat{\Psi}$ и $\hat{\bar{\Psi}}$ (за счет содержащихся в них $\hat{a}_{p_1}$ и $\hat{a}_{p_2}^+$). По отношению же ко второй паре фигурирующих в (104,1) Ψ -операторов остается после этого диагональный матричный элемент $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$, где символ $|0\rangle$ означает теперь состояние *электронно-позитронного вакуума* — поля без частиц. Таким образом, возникает второе из основных понятий теории — так называемая *электронная функция распространения* или *электронный пропагатор*, определяемый как

$$G_{ik}(x-x') = \begin{cases} -i \langle 0 | \hat{\Psi}_i(x) \hat{\bar{\Psi}}_k(x') | 0 \rangle & \text{при } t' < t, \\ i \langle 0 | \hat{\bar{\Psi}}_k(x') \hat{\Psi}_i(x) | 0 \rangle & \text{при } t < t'. \end{cases} \quad (104,6)$$

Здесь i, k — биспинорные индексы, так что G_{ik} — биспинор второго ранга.

Для амплитуды рассеяния получается в результате следующее выражение:

$$S_{fi} \sim e^2 \bar{u}_2 (e_2^* \gamma) G(p) (e_1 \gamma) u_1 + e^2 \bar{u}_2 (e_1 \gamma) G(p') (e_2^* \gamma) u_1, \quad (104,7)$$

где $p = p_1 + k_1$, $p' = p_1 - k_2$; e_1 и e_2 — 4-векторы поляризации начального и конечного фотонов ¹⁾; $G(p)$ и $G(p')$ — электронные пропагаторы в импульсном представлении.

Первый и второй члены в этом выражении представляются соответственно диаграммами Фейнмана, изображенными на рис. 16. Пунктирные свободные концы диаграммы отвечают реальным фотонам; входящим линиям

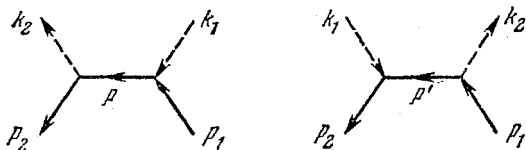


Рис. 16.

(начальный фотон) сопоставляется множитель (4-вектор) e_1 , а выходящим линиям (конечный фотон) — множитель e_2^* . Внутренняя сплошная линия, соединяющая обе вершины, отвечает виртуальному электрону; этой линии сопоставляется множитель $G(p)$. 4-импульс виртуального электрона (p или p') определяется сохранением 4-импульса в вершинах; подчеркнем, что его квадрат отнюдь не равен m^2 , как это должно было бы быть для реального электрона.

Подобно тому как изменением смысла внешних электронных концов в диаграммах на рис. 14 получились диаграммы для рассеяния электрона и позитрона, так из диаграмм на рис. 16 получаются диаграммы, отвечающие другому процессу — аннигиляции электрона p_- и позитрона p_+ с образованием двух фотонов k_1 и k_2 (рис. 17).

Описанные здесь на конкретных примерах правила являются основой, как говорят, *диаграммной техники*, позволяющей составлять амплитуды различных электро-

¹⁾ Не смешивать обозначение 4-векторов поляризации с электронным зарядом e , квадрат которого стоит в (104,7) в качестве общего коэффициента!

динамических процессов. Амплитуда процесса рассеяния, появляющегося в n -м приближении теории возмущений,

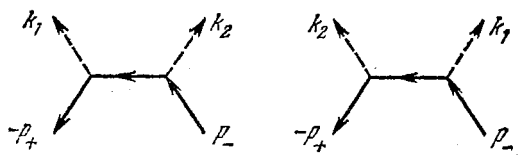


Рис. 17.

изображается совокупностью всех диаграмм, содержащих n вершин и столько свободных концов, сколько всего участвует в процессе начальных и конечных частиц. В каждой вершине сходятся три линии: одна фотонная и две (входящая и исходящая) электронные.

Так, диаграмма с тремя вершинами (рис. 18) есть одна из восьми диаграмм, отвечающих (в третьем порядке теории возмущений) излучению фотона k при столкновении электронов с 4-импульсами p_1 и p_2 (p_3 и p_4 — 4-импульсы электронов после столкновения). На этой диаграмме фотон k испускается одним из конечных электронов;

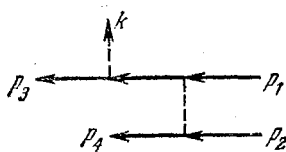


Рис. 18.

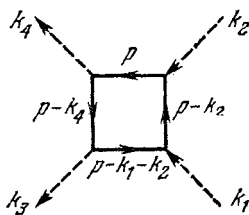


Рис. 19.

на других диаграммах фотон испускается другими электронами (и, кроме того, могут быть переставлены p_3 и p_4).

Диаграмма 4-го порядка на рис. 19 есть одна из шести диаграмм, описывающих рассеяние фотона на фотоне; остальные диаграммы отличаются от нее перестановками четырех фотонных концов ¹⁾. По сравнению с ра-

¹⁾ Рассеяние фотона на фотоне является специфическим квантово-электродинамическим процессом; в классической электродинамике оно отсутствует в силу линейности уравнений Максвелла. Существование этого эффекта означает, что квантовые явления приводят к появлению малых нелинейных добавок в уравнениях Максвелла.

нее изображенными, диаграмма на рис. 19 отличается тем, что сохранение 4-импульсов в ее вершинах (при заданных начальных k_1 , k_2 и конечных k_3 , k_4) не определяет однозначно образом 4-импульсы виртуальных электронов (внутренние сплошные линии диаграммы); одному из них можно приписать произвольное значение p . В таком случае составленное по диаграмме выражение должно еще быть проинтегрировано по всем значениям компонент 4-вектора p .

Понятие о пропагаторах играет основную роль в аппарате квантовой электродинамики. Для фактического определения амплитуд рассеяния надо раз и навсегда вычислить эти пропагаторы. Отправной точкой такого вычисления является важное математическое свойство пропагаторов, состоящее в следующем.

Оператор $\hat{\Psi}(x)$ удовлетворяет уравнению Дирака $[(\hat{p}\gamma) - m]\hat{\Psi}(x) = 0$ (поскольку каждая из волновых функций Ψ_p в разложении (103,9) удовлетворяет этому уравнению). Отсюда следует, что и функция $G(x-x')$ (в определении которой согласно (104,6) фигурирует $\hat{\Psi}(x)$) обратится в нуль при воздействии на нее оператора $(\gamma\hat{p}) - m$ во всех точках x , за исключением, однако, тех, в которых $t=t'$. Дело в том, что согласно определению (104,6) функция $G(x-x')$ стремится к различным пределам при стремлении t к t' сверху или снизу ($t \rightarrow t' + 0$ или $t \rightarrow t' - 0$). Вычисление разности этих пределов приводит к простому результату: функция G испытывает при $t=t'$ скачок, равный

$$\Delta G \equiv (G|_{t \rightarrow t' + 0} - G|_{t \rightarrow t' - 0}) = -i\gamma^0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Но если функция $G(t-t', \mathbf{r}-\mathbf{r}')$ испытывает при $t-t'=0$ скачок ΔG , то это значит, что в ее производной $\partial G/\partial t$ появляется член с δ -функцией: $\Delta G \cdot \delta(t-t')$ ¹⁾. В оператор $(\gamma\hat{p}) - m$ производная по времени входит в виде $i\gamma^0 \partial/\partial t$. Поэтому находим окончательно, что

$$[(\gamma\hat{p}) - m]G(x-x') = \delta^{(4)}(x-x'),$$

где символ $\delta^{(4)}$ означает произведение четырех δ -функций

¹⁾ Действительно, проинтегрировав производную $\partial G/\partial t$ по малому интервалу времени t вокруг точки t' , мы должны получить разность значений G по обе стороны момента $t=t'$; поскольку интегрирование δ -функции дает 1, мы и получим требуемое ΔG .

от четырех компонент стоящего в аргументе 4-вектора: $\delta^{(4)}(x-x') = \delta(t-t') \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$.

Таким образом, функция $G(x-x')$ удовлетворяет неоднородному дифференциальному уравнению — уравнению Дирака, в правую часть которого добавлена δ -функция. Такую функцию называют в математической физике функцией Грина соответствующего однородного уравнения — в данном случае уравнения Дирака. В связи с этим электронный пропагатор часто называют также и *электронной функцией Грина*.

Аналогичным образом, фотонный пропагатор оказывается функцией Грина волнового уравнения, которому удовлетворяют потенциалы электромагнитного поля (отсюда и ее другое употребительное название — *фотонная функция Грина*).

§ 105. Радиационные поправки

Диаграммная техника дает, в принципе, возможность вычислять амплитуды рассеяния не только в первом неисчезающем приближении теории возмущений, но и поправки к ним, происходящие от следующих приближений. Эти поправки называют *радиационными*.

При вычислении радиационных поправок возникают, как правило, затруднения, связанные с появлением расходящихся интегралов. В этом проявляется логическое несовершенство существующей квантовой электродинамики. В этой теории можно установить, однако, определенные предписания, позволяющие однозначным образом производить «вычитания бесконечностей» и в результате получать конечные значения для всех величин, имеющих наблюдаемый физический смысл. В основе этих предписаний лежат очевидные физические требования, сводящиеся к тому, что масса фотона должна быть равна нулю, а масса и заряд электрона должны быть равны их наблюдаемым значениям. О процедуре, состоящей в приписывании расходящимся выражениям наперед заданных значений, устанавливаемых физическими требованиями, говорят как о *перенормировке* соответствующих величин.

Диаграммы, изображающие радиационные поправки к амплитудам рассеяния, получаются из основных диаграмм их усложнением путем добавления новых вершин при неиз-

менном числе внешних концов. Так, линию виртуального фотона на диаграмме можно усложнить введением в нее «электронной петли» с двумя новыми вершинами (рис. 20, а).

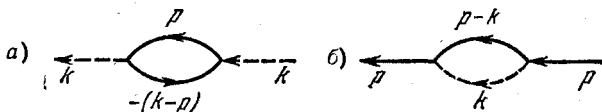


Рис. 20.

При этом 4-вектор p остается произвольным и по нему должно быть произведено интегрирование; этот интеграл оказывается расходящимся и требует перенормировки. Наглядно эту диаграмму можно описать как рождение из вакуума виртуальным фотоном k виртуальной электронно-позитронной пары (с 4-импульсами p и $k-p$) и последующую аннигиляцию пары с возникновением прежнего фотона. В связи с этим о радиационных поправках, связанных с диаграммами вида, представленного на рис. 20, а, говорят как об эффекте *поляризации вакуума*. Этот эффект приводит, в частности, к некоторому искажению кулонова поля вблизи заряженной частицы ¹⁾.

Аналогичным образом, добавлением двух новых вершин можно усложнить линию виртуального электрона (рис. 20, б). Виртуальный электрон p как бы испускает виртуальный фотон, а затем снова его поглощает.

Взаимодействие электрона с фотоном изображается на диаграммах Фейнмана вершиной — точкой, в которой фотонная линия k пересекается с электронными p_1 и p_2 (рис. 21, а).

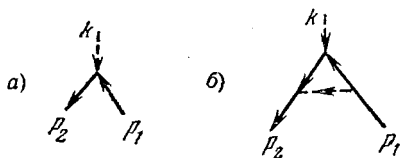


Рис. 21.

Более сложный «диаграммный блок» (рис. 21, б) представляет собой радиационную поправку к простой вер-

¹⁾ Эти искажения простираются на расстояния $\sim \hbar/mc$, где m — масса электрона.

шине. Эта поправка приводит, в частности, к важному результату: магнитный момент электрона μ перестает быть строго равным тому значению (93,9), которое следует из уравнения Дирака. С учетом радиационной поправки μ оказывается равным (в обычных единицах)

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc} \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} \right),$$

где α — постоянная тонкой структуры (эта формула была впервые получена *Юлианом Швингером* в 1949 г.).

§ 106. Радиационный сдвиг атомных уровней

Один из наиболее интересных эффектов радиационных поправок состоит в сдвиге значений атомных уровней энергии (так называемое *смещение Лэмба*). Он приводит, в частности, к снятию того последнего вырождения уровней атома водорода, которое оставалось еще по уравнению Дирака (§ 94). Не имея возможности дать здесь полный расчет этой поправки, приведем простой вывод в рамках нерелятивистской теории. Хотя этот вывод и не является вполне последовательным, он может служить иллюстрацией происхождения радиационных поправок ¹⁾.

Оператор взаимодействия электронной системы (будем говорить об атоме водорода) с полем фотонов не имеет диагональных матричных элементов (§ 95). Поэтому в первом приближении теории возмущений это взаимодействие не дает поправки к уровням энергии атома. Такая поправка возникает, однако, во втором приближении. Согласно общей формуле (32,10) поправка второго порядка к уровням энергии определяется недиагональными матричными элементами возмущения, соответствующими переходам из заданного состояния в промежуточные состояния. В данном случае речь идет о состояниях системы из атома вместе с полем фотонов, и исходным является состояние, в котором атом находится на некотором своем (n -м) уровне, а фотонов вообще нет. В промежуточных состояниях атом может находиться на любом из своих уровней, а в поле имеется один

¹⁾ Этот вывод был дан впервые *Гансом Бете* в 1947 г. и послужил отправным толчком для всего последующего развития квантовой электродинамики.

фотон. Наглядно, можно сказать, что поправка к энергии связана с излучением атомом виртуальных фотонов с последующим их поглощением ¹⁾).

Матричные элементы оператора электромагнитного взаимодействия, отвечающие излучению фотона, в нерелятивистском случае согласно (97,2) и (97,1) равны

$$-e \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} (\mathbf{e}^* \mathbf{v}_{nm}).$$

Суммирование по промежуточным состояниям включает в себя как суммирование по состояниям атома (отмеченным индексом m), так и интегрирование по импульсам фотона (т. е. по $\Omega dk_x dk_y dk_z / (2\pi)^3$) и суммирование по его поляризациям. Интегрирование по направлениям $\mathbf{k}$ и суммирование по поляризациям производится так же, как это было сделано при выводе (97,4), и в результате для поправки к энергии получается

$$-\frac{2e^2}{3\pi} \sum_m \int \frac{|\mathbf{v}_{nm}|^2 \omega d\omega}{(E_m + \omega) - E_n}, \quad (106,1)$$

где E_n, E_m — невозмущенные уровни энергии атома. Этот интеграл, однако, расходится на верхнем пределе.

Для свободного электрона выражение (106,1) представляло бы собой поправку к массе, и операция перенормировки состояла бы просто в отбрасывании его целиком — уже «невозмущенная» масса электрона есть ее наблюдаемое значение. С другой стороны, для свободного электрона оператор скорости $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}}/m$ имеет только диагональные матричные элементы $\mathbf{v}_{nn}$, совпадающие с определенными (для свободной частицы) значениями $\mathbf{v}$. Сумма по m в (106,1) сводится при этом к одному члену ($m=n$):

$$-\frac{2e^2}{3\pi} \int \mathbf{v}^2 d\omega.$$

Перенормировочную постоянную для связанного (в атоме) электрона получим, заменив квадрат скорости $\mathbf{v}^2$ на его среднее значение в заданном состоянии атома, т. е. на мат

¹⁾ В нерелятивистской теории виртуальность фотона проявляется в несоблюдении закона сохранения энергии при его испускании или поглощении. Что касается рождения виртуальных электронно-позитронных пар, то в нерелятивистском приближении оно отсутствует

ричный элемент $(\mathbf{v}^2)_{nn}$. Но по правилу умножения матриц имеем

$$(\mathbf{v}^2)_{nn} = \sum_m \mathbf{v}_{nm} \mathbf{v}_{mn} = \sum_m |\mathbf{v}_{nm}|^2.$$

Таким образом, приходим к выражению

$$-\frac{2e^2}{3\pi} \sum_m \int |\mathbf{v}_{nm}|^2 d\omega,$$

которое надо вычесть из (106,1) для того, чтобы получить наблюдаемое значение поправки к уровню энергии:

$$\delta E_n = \frac{2e^2}{3\pi} \sum_m \int \frac{|\mathbf{v}_{nm}|^2 (E_m - E_n)}{E_m - E_n + \omega} d\omega. \quad (106,2)$$

Этот интеграл все еще расходится на верхнем пределе, но уже только логарифмически; в последовательной релятивистской теории этой расходимости в действительности не остается. В рамках же нерелятивистской теории можно получить хорошую оценку величины δE_n , распространив интегрирование в (106,2) от 0 до значения электронной массы m , — имея в виду, что нерелятивистское рассмотрение допустимо только при частотах фотона $\omega \ll m$ и что значение логарифмического интеграла мало чувствительно к точному выбору его верхнего предела (большого по сравнению со всеми разностями уровней энергии атома $E_m - E_n$).

Наконец, заменив матричные элементы скорости электрона матричными элементами дипольного момента согласно (97,1), получим окончательно (в обычных единицах)

$$\delta E_n = \frac{2}{3\pi \hbar^3 c^3} \sum_m |\mathbf{d}_{nm}|^2 (E_m - E_n)^3 \ln \frac{mc^2}{|E_m - E_n|}. \quad (106,3)$$

Это смещение зависит от всех квантовых чисел электрона в атоме — от главного квантового числа n , полного момента j и орбитального момента l . Поэтому после введения поправки (106,3) оказываются различными также и бывшие ранее взаимно вырожденными уровни с одинаковыми n , j и различными $l = j \pm \frac{1}{2}$ ¹⁾.

¹⁾ Так, для частоты, соответствующей разности уровней $E(2s_{1/2}) - E(2p_{1/2})$, численное вычисление по формуле (106,3) приводит к значению ≈ 1000 Мгц (точный же релятивистский расчет дает значение 1050 Мгц).

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Альтернативный запрет 346
Аннигиляция 303

Биспинор 286
Бозоны 160
Боровский радиус 116

Вакуумное состояние 356
Варнационный принцип 81
Векторная модель 63
Векторного сложения коэффициенты 64
Взаимодействие сильное 266, 312
— слабое 312, 319
— спин-орбитальное 179, 324
— спин-спиновое 179
Волновая функция 16
Волновой пакет 32
Вырождение уровней 40, 57, 58
— случайное 119

Гетерополярная связь 211
Гомеополярная связь 211
Группа Лоренца 280

Де-Бройлевская длина волны 75
Дипольный момент 192
Дырки 179, 190, 304

Единицы атомные 116
— релятивистские 265

Закон $1/r^2$ 258
Заряд поля 304
Зарядовая четность 307, 328
Зарядовое сопряжение 307

Измерение 2, 83, 138
Инверсия 69
— комбинированная 312
— четырехмерная 314

Каналы реакции 251
Квадрупольный момент 194
Квантовое число азимутальное 109
— — главное 118, 176
— — магнитное 109
— — радиальное 109
Клетки в фазовом пространстве 100
Когерентность 347
Коммутативность операторов 26
Конфигурационное пространство 16

Магнетон Бора 154
Магнитный момент 154, 200, 320, 365
Матрица рассеяния 265, 353
Матрица Паули 146
Множитель Ланде (гиромангнитный) 199
Мультиплетность 176, 203

Неприводимые представления 28, 65, 151

Оператор рождения и уничтожения 167, 168
— самосопряженный 23
— сопряженный 23
— транспонированный 22
— эрмитов 23, 43

Осциллятор ангармонический 125
— пространственный 115
Осцилляционная теорема 82

Парциальная амплитуда 226
Перенормировка 363
Плоская волна 75, 78, 101
Позитроний 306, 308
Полная система функций 20, 24
Полный набор величин 15
Поляризуемость атома 196
Постоянная Планка 31
— тонкой структуры 326
Потенциальная яма 80, 84, 114, 124
Потенциальный барьер 81, 103
Правила отбора 66, 336
Правило интервалов Ланде 181
— Хунда 178
Представление взаимодействия 351
— гейзенберговское 271
— импульсное 49
— шредингеровское 271
Принцип Паули 162
— соответствия 336

Самосогласованное поле 176
Сверхтонкое расщепление 182, 340
Смещение Лэмба 326, 365
Собственные значения 19
— функции 19
Сопряженное дираковское 295
Составное ядро 140
Состояние основное 39, 82
— связанное 41
— смешанное 34
— чистое 34
Спиральность 276, 316
Статистический вес 254, 333

Теорема Крамерса 195
— оптическая 257
Тип связи рассель-саундеровский 182
— — fj 182
Ток перехода 330
Тормозное излучение 340

Уравнение Паули 323
Уровни виртуальные 235
— Ландау 157

Фазовый множитель 20
— сдвиг 112
Фермионы 160
Формула Ланджевена 201
Форм-фактор атомный 248
Функция Грина 363

Частота перехода 42
Числа заполнения 165

Ширина уровня 139

Эквивалентные электроны 177
Электронная конфигурация 177
Эффект Зеемана 198
— Комптона 359
— Штарка 194